### Борисюк Петр Викторович

## ПРАКТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

# КАФЕДРА «Физико-технических проблем метрологии»





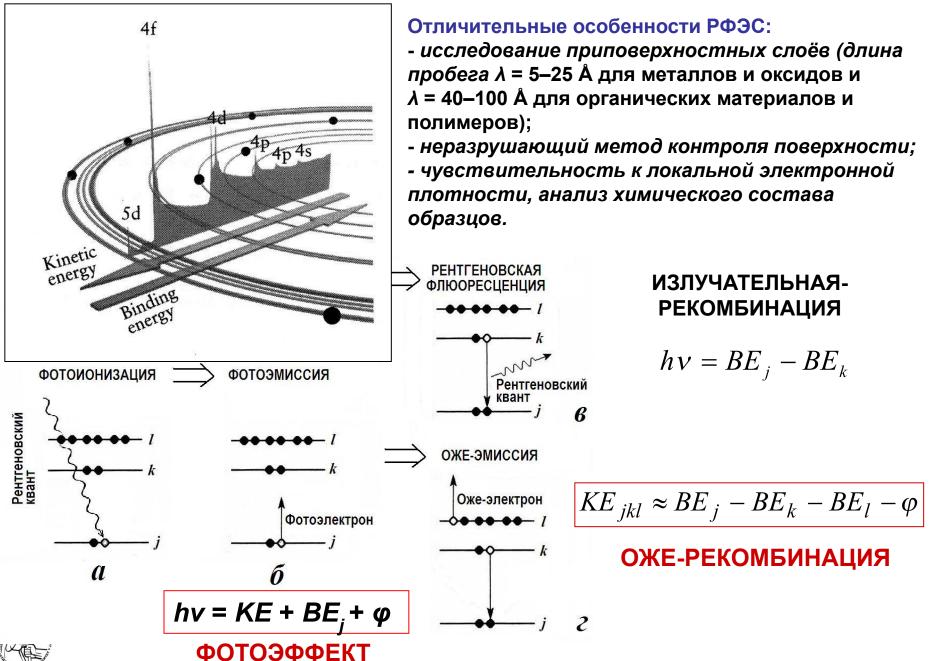
### <u>Лекция 1 Классификация и краткое описание основных спектроскопических методов исследования поверхности и наноструктур.</u>

Разные методы позволяют получить различную информацию об исследуемом объекте: информация об их атомной структуре, элементном составе и электронных свойствах. Возможности основных методов исследования наноструктур и поверхности с точки зрения получаемой с их помощью информации.

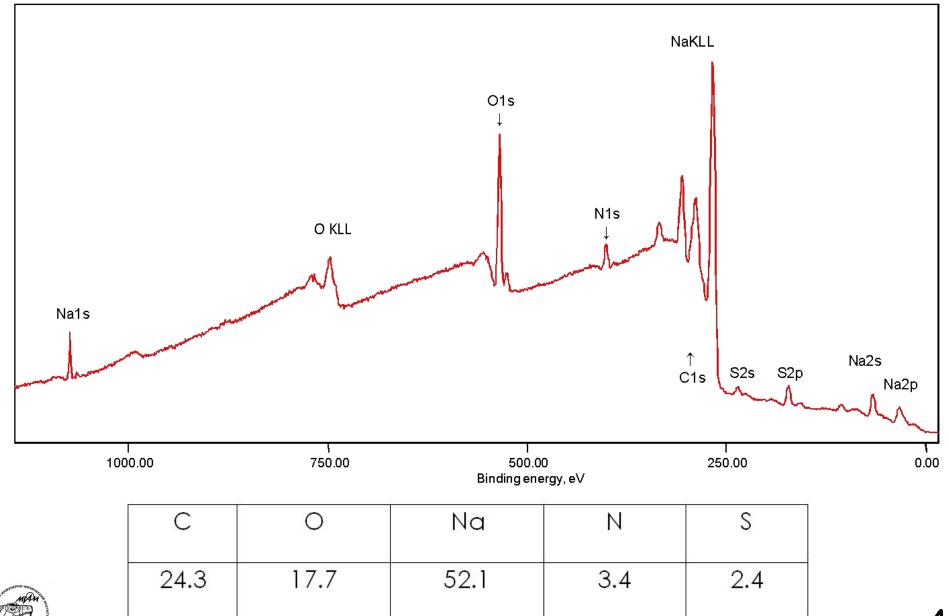
Метод		Атомная	Элементный	'Danamananana
Русское	Английское		состав	Электронные свойства
название	название	структура	COCTAB	СБОИСТБА
PCA,	XRD,			
ДМЭ/ДБЭ,	LEED/HEED,			
ПЭМ, РЭМ,	TEM, SEM,	+	-	-
ПЭМ, ПИМ,	FEM, FIM,			
ACM, MCM	AFM, MFM			
CTM/CTC	STM/STS	+	1	+
СРБИ, ОРР	HEIS, RBS	+	+	-
СРМИ	LEIS	(+)	+	(+)
ПТСРСП	EXAFS	+	+	-
ОСРСП	XANES	(+)	+	+
ОЭС, СОЭМ	AES, SAEM	<b>-</b> /+	+	+
PCMA	EDX/WDX	ı	+	-
ВИМС	SIMS	ı	+	-
РАС, РЭС	XAS, XES	-	+	(+)
ТПД	TPD	-	+	(+)
РФЭС/ЭСХА	XPS/ESCA,	-	+	+
ФЭС, РОЭС	PES, XAES			
УФЭС,	UPS, IPES	-	-	+
ИФЭС				
СХПЭЭ	EELS	1	-	+
ИНС	INS	-	-	+



### Физические принципы РФЭС И ОЭС



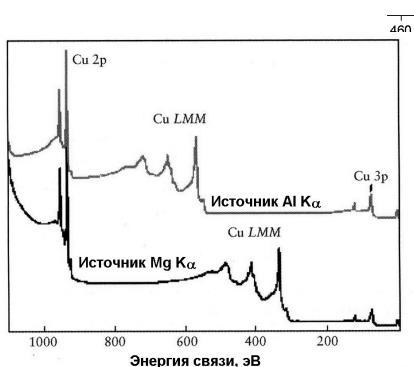
# **Пример:** обзорный спектр и относительная атомная концентрация элементов в поверхностном слое образца

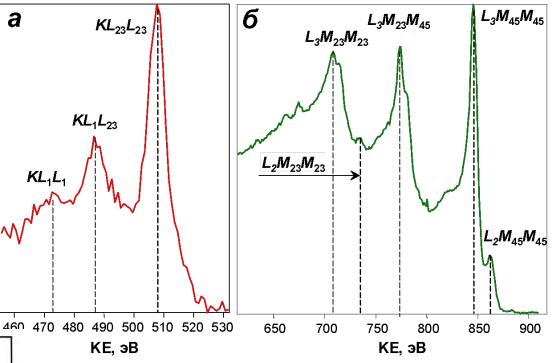




### Спектры оже-серий в РФЭС

- 1) Серия KLL оже-переходов  $(KL_1L_1, KL_1L_2, KL_1L_3, KL_2L_3, KL_2L_3, KL_3L_3)$  от В до Na (MgK $\alpha$ ), до Mg (AlK $\alpha$ );
- 2) Серия LMM, от S до Ge (MgKα), до Se (AlKα);
- 3) Серия MNN, от Mo до Nd (MgKα), до Se (AlKα);

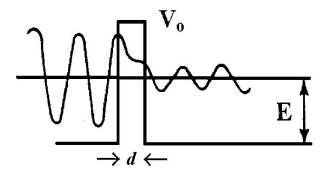




Зависимость положения линий фотоэлектронов и оже-электронов в шкале ВЕ и КЕ от энергии источника рентгеновского излучения.

$$KE_{jkl} = BE_j - BE_k - BE_l - \varphi$$

### Физические основы СТМ и СТС



### Туннелирование электрона через потенциальный барьер:

одномерная задача для свободного электрона



$$-\frac{\mathbb{Z}^{2}}{2m}\frac{d^{2}\psi}{dx^{2}} + (V(x) - E)\psi = 0 \qquad \qquad \psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0), \\ Ce^{kx} + De^{-kx} & (0 < x < d), \\ Fe^{ikx} & (x > d), \end{cases}$$

$$k=\sqrt{2mE}$$
 /  $\mathbb{Z}$   $\kappa=\sqrt{2m(E-V_0)}$  /  $\mathbb{Z}$  Обратная длина затухания  $\kappa$  ~ 1 A<sup>-1</sup>

Коэффициент пропускания 
$$T=\left|F/A\right|^2$$
 при  $d>>1/\kappa$   $Tpprox rac{16k^2\kappa^2}{k^2+\kappa^2}\,\mathrm{e}^{-2\kappa d}$ 

Экспоненциальная зависимость туннельного тока ширины барьера:

$$I = B\left(\overline{\phi} \exp(-Ad\sqrt{\overline{\phi}}) - \left(\overline{\phi} + eV\right) \exp(-Ad\sqrt{\phi + eV})\right)$$

при увеличении ширины барьера (расстояния между зондом и образцом) на 1 Å туннельный ток уменьшится в ~ 7 раз:



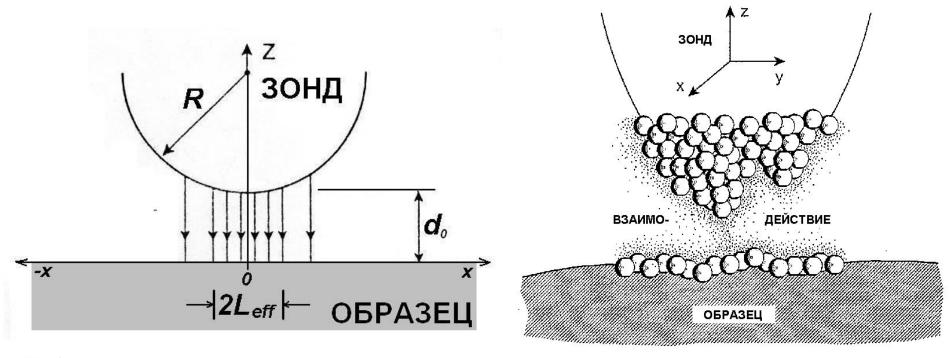
$$\frac{I(d)}{I(d+\Delta d)} = \frac{\exp(-2\kappa d)}{\exp(-2\kappa(d+\Delta d))} = \exp(2\kappa\Delta d) \sim e^2$$

### Оценка величины туннельного тока

$$I \approx en\rho_s v_F STV$$

при 
$$n\sim 10^{22}\,\mathrm{cm^{-2}},~~\rho_s\sim 0.5~\mathrm{эB^{-1}},~v_F\sim 10^8~\mathrm{cm/c},~S\sim a^2\sim 10^{-15}\mathrm{cm^2},~V\sim 1~\mathrm{B}$$
  $T=\exp(-2\kappa d)\sim 10^{-4}~\mathrm{при}~~\kappa\sim 10~\mathrm{hm^{-1}}~\mathrm{u}~d\sim 0.4^{\mathrm{HM}}_{\mathrm{получаем}}~~I\sim 10~\mathrm{hA}.$ 

### Пространственное разрешение СТМ





#### Лекция 3 Сканирующая туннельная спектроскопия.

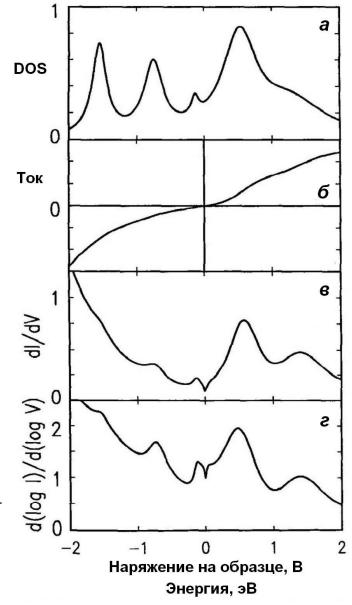
Дифференциальная туннельная проводимость

$$\frac{dI}{dV} \sim \rho_{s}(eV)T(\overline{\varphi}, d, eV, eV) + \\
+ \int_{E_{F}}^{E_{F}+eV} \rho_{s}(\varepsilon) \frac{dT(\overline{\varphi}, d, eV, \varepsilon)}{dV} d\varepsilon$$

$$\frac{dI/dV}{I/V}$$
 ~

$$\sim \frac{P_{s}(eV) + \int_{E_{F}}^{E_{F}+eV} \frac{\rho_{s}(\varepsilon)}{T(\overline{\varphi}, d, eV, \varepsilon)} \frac{dT(\overline{\varphi}, d, eV, \varepsilon)}{dV} d\varepsilon}{\frac{1}{V} \int_{E_{F}}^{E_{F}+eV} \rho_{s}(\varepsilon) \frac{T(\overline{\varphi}, d, eV, \varepsilon)}{T(\overline{\varphi}, d, eV, eV)} d\varepsilon} d\varepsilon} \stackrel{\text{So}_{2}}{= 0}$$

$$\frac{1}{V}\int_{E_{F}}^{E_{F}+eV}\rho_{s}(\varepsilon)\frac{T(\overline{\varphi},d,eV,\varepsilon)}{T(\overline{\varphi},d,eV,eV)}d\varepsilon$$





# Монтаж СВВ камеры СТМ/АСМ на комплексе анализа поверхности и наноструктур Multiprobe MXPS VT AFM, Omicron NanoTechnology GmbH в наноцентре НИЯУ МИФИ





### Спектроскопия рассеяния медленных ионов.

### Классификация методов рассеяния ионов:

- CPMИ (LEIS), E=0,1 10 кэВ;
- CPCИ (MEIS)
- СРБИ (HEIS), E=0.01-2 MэB;
- OPP (RBS), E > 2 МэВ

### Получаемая информация:

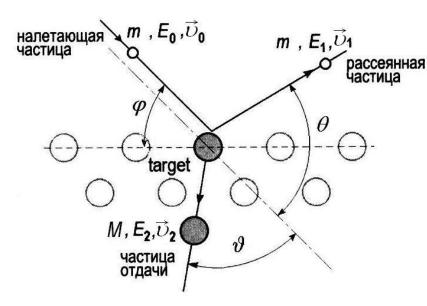
- 1) Элементный состав поверхности образца (положение линий);
- 2) Относительная концентрация поверхностных атомов (интенсивность линий);
- 3) Структура поверхностной решетки (угловые зависимости);
- 4) Химическое состояние поверхностных атомов (тонкая структура, иногда).

Особенности метода СРМИ: Глубина зондирования один-два атомных слоя поверхности, вследствие:

- 1) ослабления интенсивности ионного пучка по мере его проникновения вглубь образца вследствие большого сечения рассеяния;
- 2) увеличения вероятности нейтрализации ионов, рассеянных на глубоких поверхностных слоях.

<u>Историческая справка.</u> Первое применение РМИ для исследования поверхности (1967).

### СРМИ. Кинематический фактор.



$$E_1 = kE_0$$

$$k = \frac{1}{(1+\mu)^2} \left[\cos\theta \pm \left(\mu^2 - \sin^2\theta\right)^{1/2}\right]^2$$

$$\mu = M/m$$

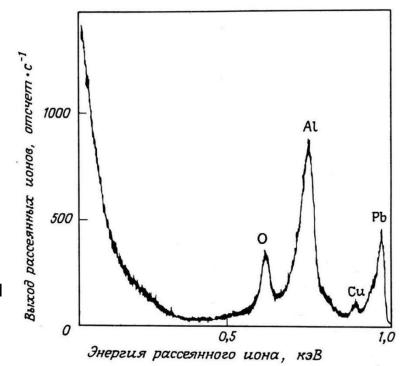
знак «+» при рассеянии на тяжелом атоме, знак «-» при рассеянии на легком атоме

### Учет неупругих потерь энергии – фактор Q:

$$k = \frac{1}{(1+\mu)^2} \left[ \cos \theta \pm \left( \mu^2 - \sin^2 \theta - \mu (1+\mu) \frac{Q}{E_0} \right)^{1/2} \right]^2$$

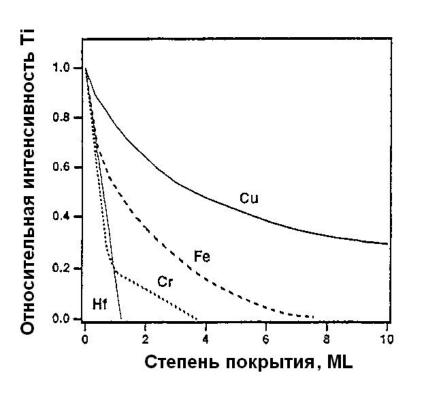
$$I = I_0 N \frac{d\sigma}{d\Omega} \Omega_0 P_i$$

Сечение рассеяния определяется потенциалом взаимодействия иона и атома-рассеивателя



### Применение метода СРМИ для определения степени покрытия поверхности

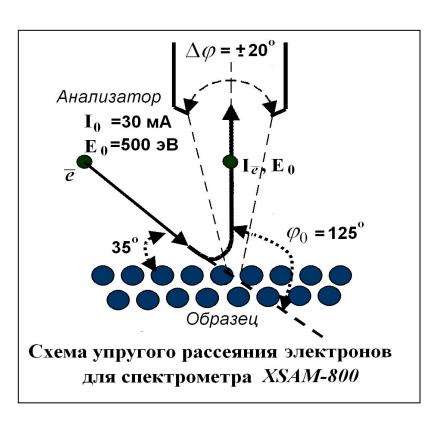
$$\theta = I(\theta)/I^{\infty}$$







### Спектроскопии рассеяния электронов на отражение СРЭО



$$I_e \sim \frac{d\sigma}{d\Omega}(\varphi)$$

 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 

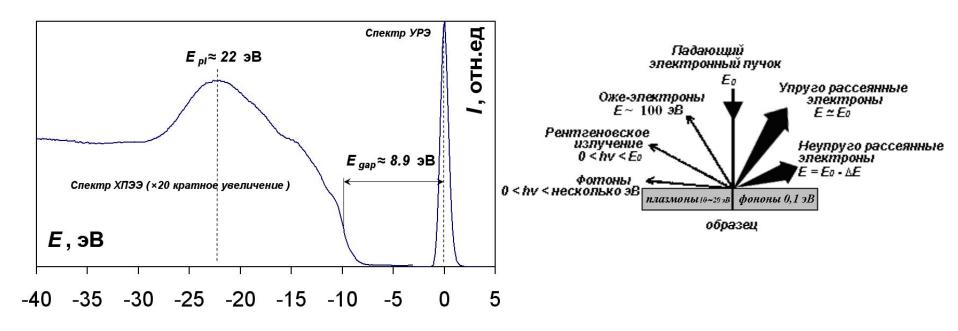
- дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов на атомах образца;

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\varphi) = |f(\varphi)|^2 S(q) \exp(-2W(q))$$

$$I_e \sim |f(\varphi)|^2 S(q) \exp(-2W(q))$$



### Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов СХПЭЭ



$$rac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \Omega} \sim \operatorname{Im} \left( rac{1}{arepsilon(q,\omega)} 
ight)$$

- дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов на атомах образца;

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{f_0 \omega_{pl}^2}{\omega^2 + i\omega \gamma_0} + \sum_{j=1}^n \frac{f_j \omega_{pl}^2}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega \gamma_j}$$



# Экспериментальные спектры рассеяния отраженных электронов для системы кластеров Au

