План

I. Введение

II. Ионная спектроскопия

III. Электронная спектроскопия

IV. Рентгеновская спектроскопия

II. Ионная спектроскопия

Современные методы исследования поверхности полупроводников

II. Ионная спектроскопия

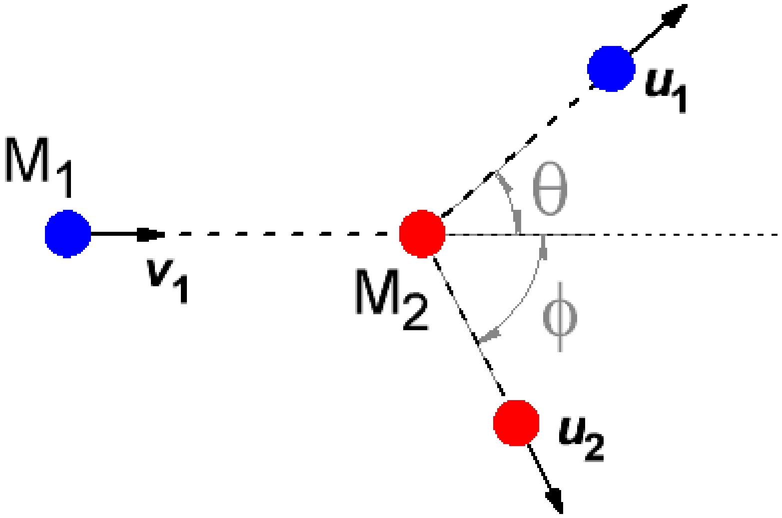
1. Упругое соударение двух частиц. Кинематический фактор
2. Рассеяние заряженной частицы в центральном поле. Прицельный параметр. Сечение рассеяния. Формула Резерфорда
3. Потеря энергии заряженной частицей $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$

II. Ионная спектроскопия (продолжение)

4. Спектроскопия рассеяния быстрых ионов (СРБИ), резерфордовское обратное рассеяния (РОР)
5. Спектроскопия рассеяния медленных ионов (СРМИ)
6. Вторичная ионная масс-спектрометрия (ВИМС)

II. Ионная спектроскопия

1. Упругое соударение двух частиц. Кинематический фактор
2. Рассеяние заряженной частицы в центральном поле. Прицельный параметр. Сечение рассеяния. Формула Резерфорда
3. Потеря энергии заряженной частицей $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$



Законы сохранения импульса и энергии:

$$M_1 v_1 = M_1 u_1 \cos\theta + M_2 u_2 \cos\varphi$$

$$0 = M_1 u_1 \sin\theta - M_2 u_2 \sin\varphi$$

$$\frac{1}{2} M_1 v_1^2 = \frac{1}{2} M_1 u_1^2 + \frac{1}{2} M_2 u_2^2$$

Исключая из системы u_2 и φ, получим

$$u_1 = v_1 \cdot \frac{M_1 \cos\theta \pm \sqrt{|M_2^2 - M_1^2 \sin^2\theta|}}{M_1 + M_2}$$

Отношение кинетических энергий

$$\mu = M_2/M_1$$

$$\boxed{\frac{E'_{\text{К}}}{E_{\text{К}}} = \frac{u_1^2}{v_1^2} = \left(\frac{\cos\theta \pm \sqrt{|\mu^2 - \sin^2\theta|}}{1+\mu}\right)^2 = K}$$

K– **кинематический фактор.**

«+» – рассеяние на тяжёлых атомах ($\mu > 1$)

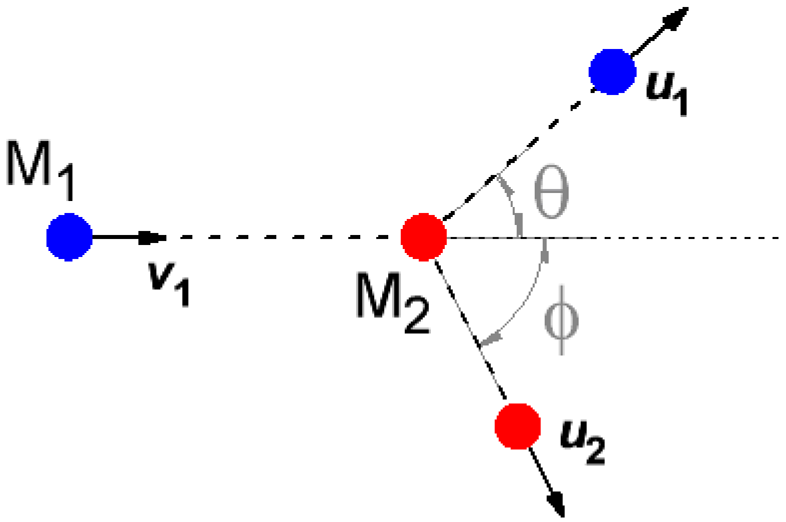
«-» – рассеяние на лёгких атомах ($\mu < 1$)

Энергия частицы после соударения

$$E_{К_1} = K \cdot E_0$$

Энергия отдачи, приобретаемая атомом отдачи, при этом составляет

$$E_{К_2} = \frac{4\mu}{(1+\mu)^2} \cdot \cos^2\varphi \cdot E_0$$



Для иона гелия $^4He^+$ с энергией 2 МэВ, налетающего на атом кремния ($M_2 = 28$ а. е. м.) и отражающегося обратно ($\theta = 180°$) кинематический фактор равен

$$\mu = \frac{28}{4} = 7;\ K_{Si} = \left(\frac{\mu - 1}{1 + \mu}\right)^2 = \left(\frac{7 - 1}{1 + 7}\right)^2 = 0{,}56.$$

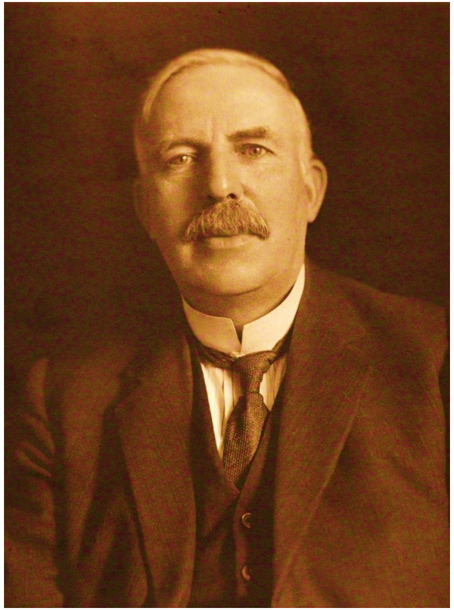
Для того же иона, но налетающего на атом углерода ($M_2 = 12$ а. е. м.)

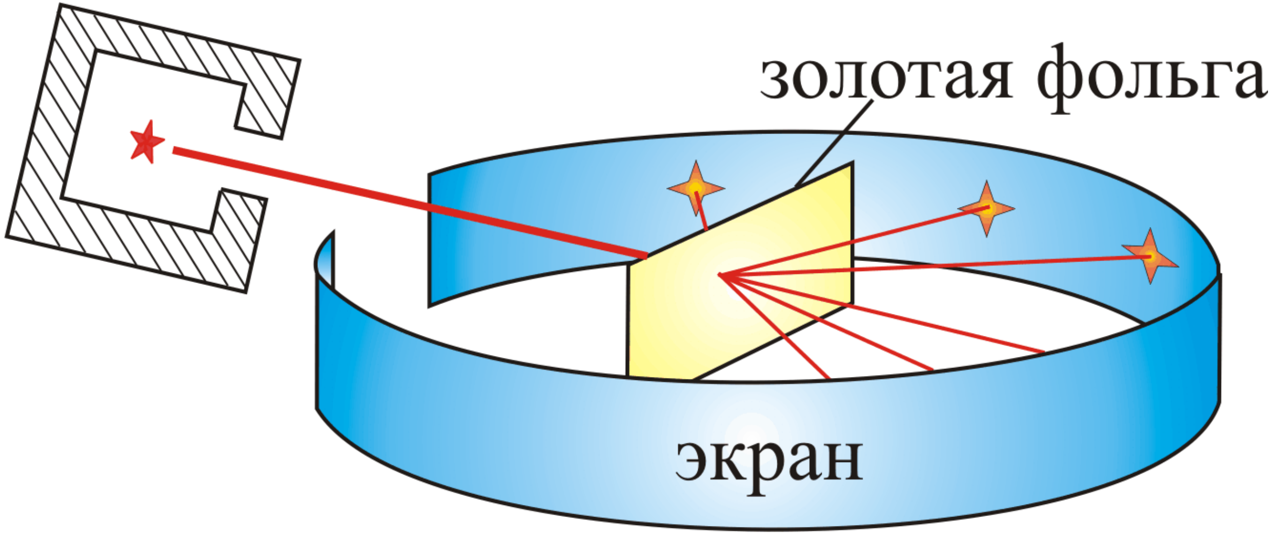
$$\mu = \frac{12}{4} = 3;\ K_C = \left(\frac{3 - 1}{1 + 3}\right)^2 = 0{,}25.$$

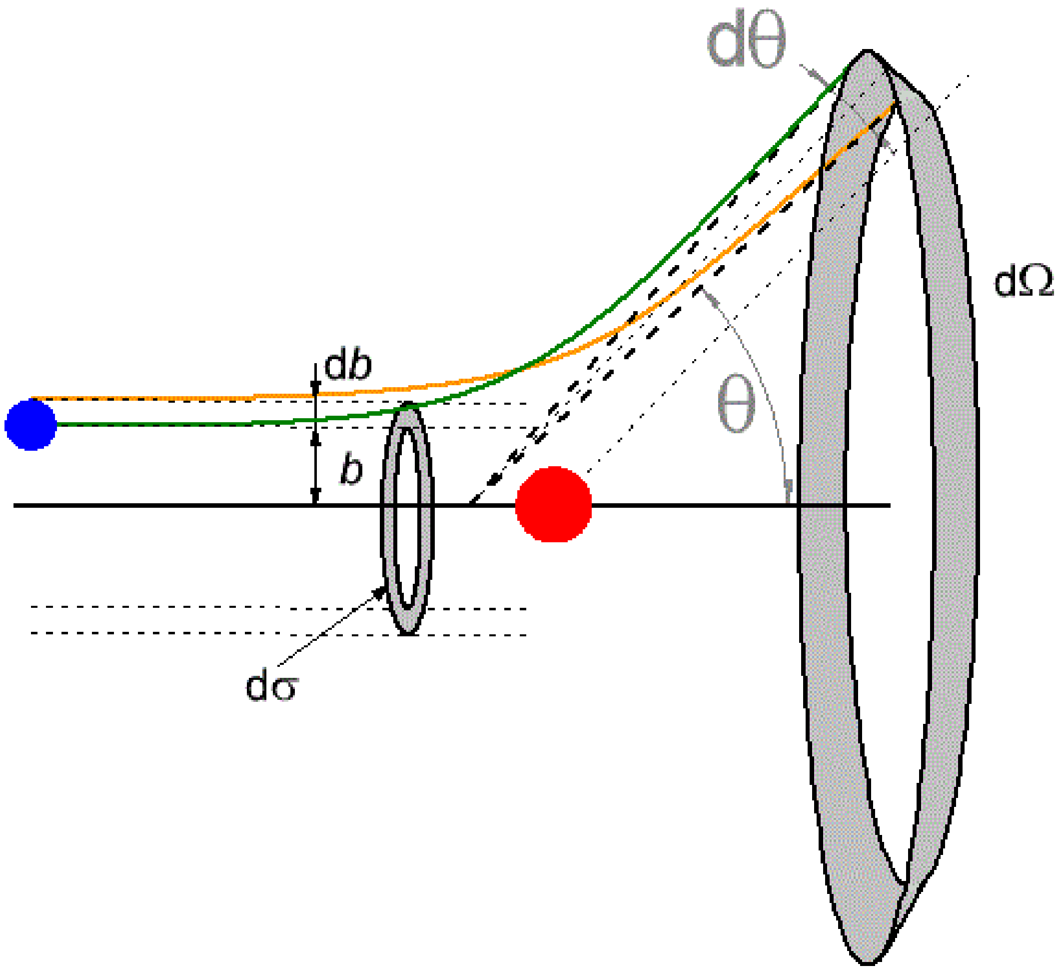
II. Ионная спектроскопия

1. Упругое соударение двух частиц. Кинематический фактор
2. Рассеяние заряженной частицы в центральном поле. Прицельный параметр. Сечение рассеяния. Формула Резерфорда
3. Потеря энергии заряженной частицей $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$

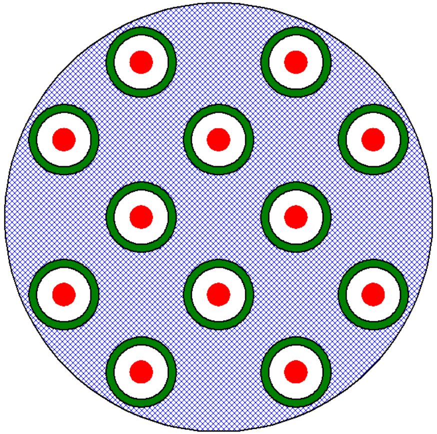
Опыт Резерфорда (1911 г.)







b – **прицельный параметр** (расстояние между траекторией налетающей частицы и параллельной прямой, проведённой через центр атома мишени)



Вероятность рассеяния на угол в интервале от θ до $\theta + \mathrm{d}\theta$:

$$\mathrm{d}P = \frac{\mathrm{d}Q}{Q},$$

где $\mathrm{d}Q$ – число рассеянных частиц в телесный угол $\mathrm{d}\Omega$, Q – число налетающих частиц.

$$\mathrm{d}P = N_s \mathrm{d}\sigma,$$

где N_s – количество рассеивающих центров на поверхности мишени, $\mathrm{d}\sigma$ – дифференциальное сечение рассеяния.

$$\mathrm{d}Q = Q \cdot N_s \cdot \mathrm{d}\sigma$$

Дифференциальное сечение рассеяния – доля поперечной площади в окрестности атома мишени, пройдя которую, налетающая частица рассеется в телесный угол $\mathrm{d}\Omega$.

$$\mathrm{d}\sigma = \pi(b + \mathrm{d}b)^2 - \pi b^2 = \pi[\mathrm{d}b \cdot (2b + \mathrm{d}b)] = 2\pi b \cdot \mathrm{d}b$$

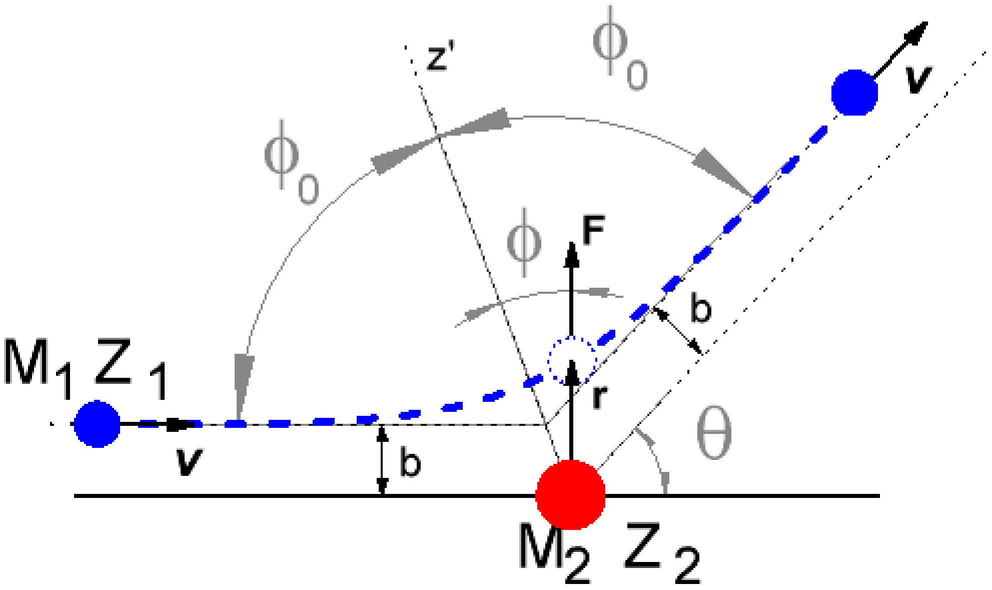
Телесный угол, в который попадают рассеянные частицы:

$$\mathrm{d}\Omega = \int_0^{2\pi} (\sin\theta \, \mathrm{d}\theta)\mathrm{d}\varphi = 2\pi \sin\theta \, \mathrm{d}\theta$$

Полное сечение рассеяния:

$$\Sigma = \int d\sigma = \int\limits_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

$$\boxed{2\pi b db = -\frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta \, d\theta}$$



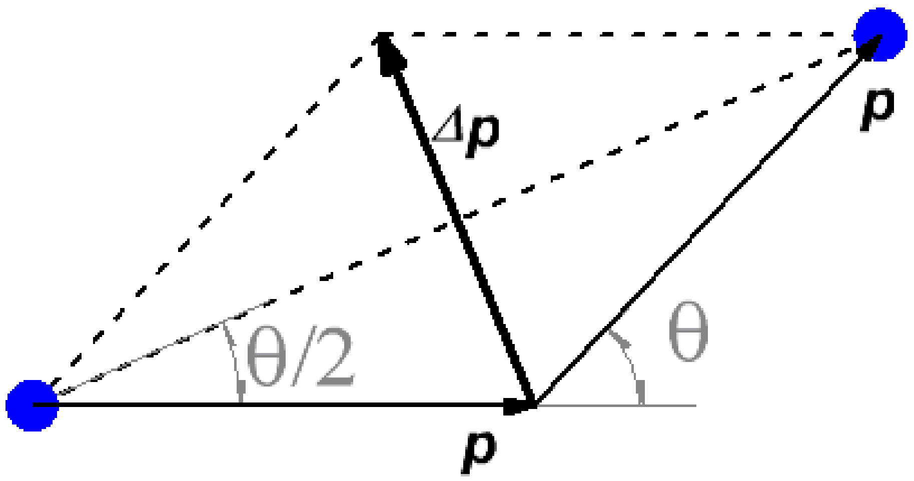
$\boldsymbol{p}_1$,$\boldsymbol{p}_2$ – импульсы частицы до и после взаимодействия

$$p_2 = p_1 = M_1 v$$

$\boldsymbol{F}$ – сила Кулона

$$F = k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^2}$$

$$k_c = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \approx 9 \cdot 10^9 \text{ м/Ф}$$



$$\Delta \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1$$

$$\boxed{\Delta p = 2p_1 \sin\frac{\theta}{2} = 2M_1 v \sin\frac{\theta}{2}}$$

Изменение импульса $\Delta\boldsymbol{p}$ происходит под действием силы $\boldsymbol{F}$.

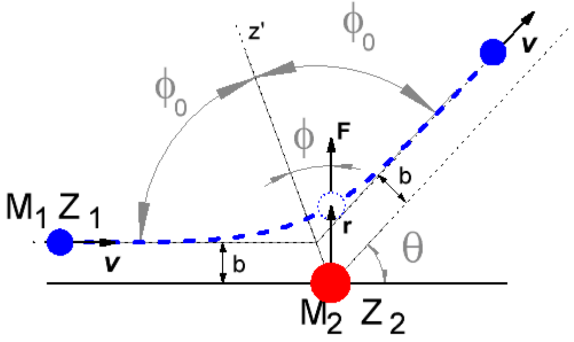
Второй закон Ньютона:

$$\boldsymbol{F} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} \rightarrow \mathrm{d}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{F}\mathrm{d}t$$

$$\Delta p = \int \mathrm{d}\boldsymbol{p} = \int_{t_1}^{t_2} \boldsymbol{F}\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} F\cos\varphi\,\mathrm{d}t = k_c Z_1 Z_2 e^2 \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \frac{\cos\varphi}{r^2} \cdot \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\varphi}\mathrm{d}\varphi$$

Угол поворота вдоль оси z' одинаков и равен φ_0.

$$\varphi_1 = -\varphi_0, \varphi_2 = \varphi_0$$



$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$ – угловая скорость

Закон сохранения момента импульса $L_1 = L_2$:

$L_1 = M_1 v b$ – момент импульса до взаимодействия

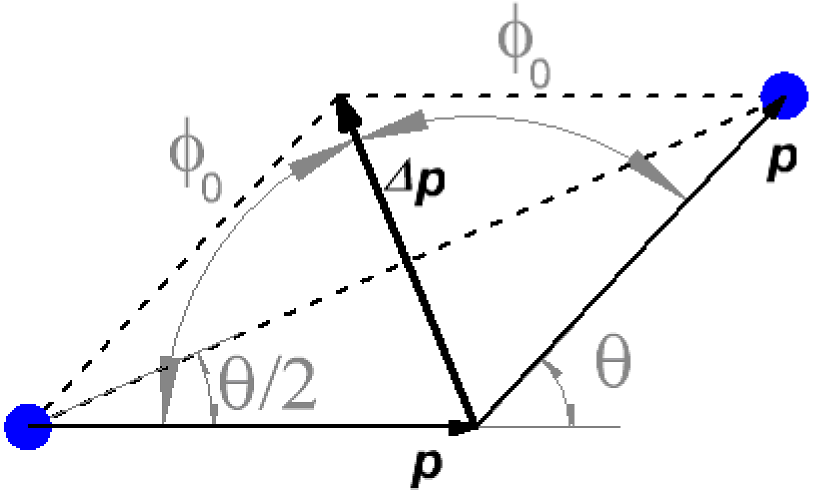
$L_2 = M_1 r^2 \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$ – момент импульса во время взаимодействия

$$M_1 v b = M_1 r^2 \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$$

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{r^2}{vb}$$

$$\Delta p = k_c Z_1 Z_2 e^2 \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \frac{\cos\varphi}{r^2} \cdot \frac{r^2}{vb} \mathrm{d}\varphi = k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{vb} (\sin\varphi_1 - \sin\varphi_2)$$

$$\Delta p = 2 k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{vb} \sin\varphi_0$$



Связь между углами φ_0 и θ:

$$2\varphi_0 + \theta = \pi$$

$$\varphi_0 = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}$$

$$\boxed{\Delta p = 2k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{vb} \cos\frac{\theta}{2}}$$

$$\Delta p = 2M_1 v \sin\frac{\theta}{2} = 2k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{vb} \cos\frac{\theta}{2}$$

$$\boxed{b = k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{M_1 v^2} \operatorname{ctg}\frac{\theta}{2}}$$

$$\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta} = -k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2M_1 v^2} \cdot \frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = -\frac{2\pi b}{\sin\theta} \cdot \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}}$$

Формула Резерфорда

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = k_c^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2M_1 v^2}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = k_c^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_\text{К}}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}}$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \propto Z_2^2$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \propto \frac{1}{E_\text{К}^2}$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \propto \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

Расстояние **наибольшего сближения** d налетающей частицы и атома мишени – расстояние, при котором кинетическая и потенциальная энергии частицы равны:

$$E_{\text{К}} = E_{\Pi} = k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d}$$

$$\boxed{d = k_c \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_{\text{К}}}}$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{d}{4}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}}$$

Для иона гелия $^4He^+$ ($Z_1 = 2$) с энергией 2 МэВ расстояние наибольшего сближения с атомом кремния ($Z_2 = 14$) и сечение рассеяния при обратном рассеянии составляют

$$d = 9 \cdot 10^9 \,{}^{\text{м}}\!/\!_{\Phi} \cdot \frac{2 \cdot 14 \cdot (1{,}6 \cdot 10^{-19}\ \text{Кл})^2}{(2 \cdot 10^6 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19})\ \text{Дж}} \approx 2 \cdot 10^{-14}\ \text{м} = 0{,}02\ \text{пм}$$

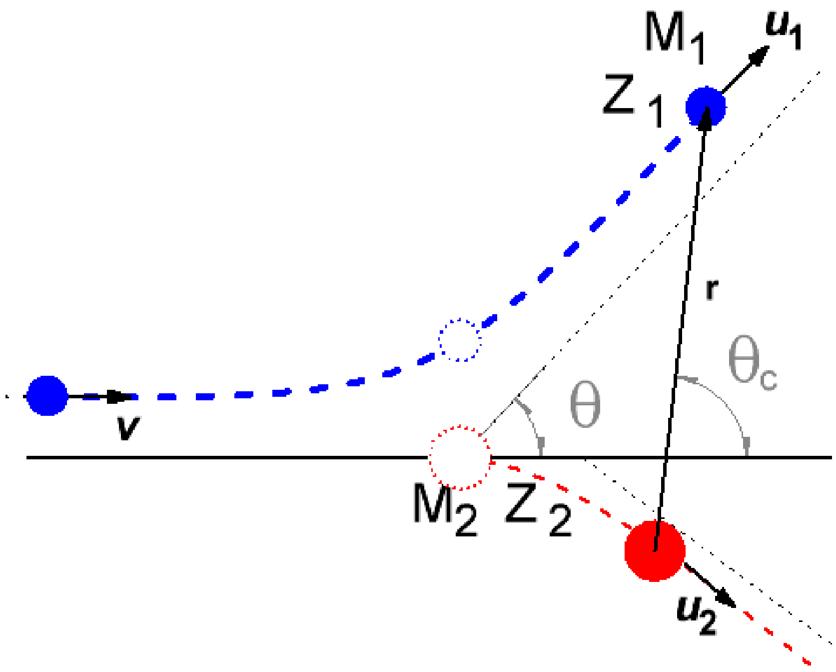
$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{d}{4}\right)^2 = 4 \cdot 10^{-28}\ \text{м}^2/\text{ср} = 4\ \text{бн/ср (барн/стерадиан)}$$

Боровский радиус $a_0 = 53$ пм

Эффективный радиус К-оболочки атома кремния $\frac{a_0}{Z_2^{1/3}} = 22$ пм

Неэкранированное сечение рассеяния (экранирование электронами)

Сечение рассеяния с учётом эффекта отдачи



$$\operatorname{tg}\theta = \frac{\sin\theta_c}{\cos\theta_c + \frac{M_1}{M_2}}$$

$$M_2 \gg M_1 \Rightarrow \theta = \theta_c$$

Эффект необходимо учитывать для лёгких атомов мишени

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = k_c^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{\mathrm{K}}}\right)^2 \cdot \frac{4}{\sin^4\theta} \cdot \frac{\left(\sqrt{1-(1/\mu\cdot\sin\theta)^2}+\cos\theta\right)^2}{\sqrt{1-(1/\mu\cdot\sin\theta)^2}}}$$

При $M_2 \gg M_1$ формула раскладывается в ряд

поправка

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = k_c^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{\mathrm{K}}}\right)^2 \left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2} - \boxed{\frac{2}{\mu^2}} + \cdots\right]$$

При рассеянии иона гелия $^{4}He^{+}$ на атоме кремния ^{28}Si поправка даёт $2 \cdot \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^2 = 2 \cdot \left(\frac{4}{28}\right)^2 \approx 4\ \%$, а на атоме углерода ^{12}C – $2 \cdot \left(\frac{4}{12}\right)^2 \approx 22\ \%$.

Следовательно, заметно только на **лёгких элементах** и при **точном количественном расчёте**.

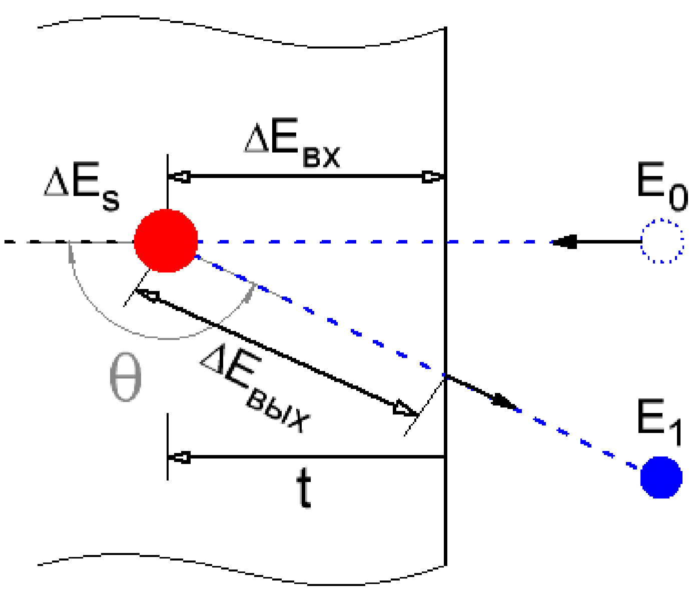
Задача

- Рассчитать кинематический фактор в случае рассеяния протонов $^{1}H^{+}$ и ионов гелия $^{4}He^{+}$ на атомах титана и углерода (угол рассеяния $170°$) в соединении TiC.

II. Ионная спектроскопия

1. Упругое соударение двух частиц. Кинематический фактор
2. Рассеяние заряженной частицы в центральном поле. Прицельный параметр. Сечение рассеяния. Формула Резерфорда
3. Потеря энергии заряженной частицей $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$

Потеря энергии заряженной частицей



$$\Delta E_{\text{вх}} = \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E_0} \cdot t$$

$$E_t = E_0 - \Delta E_{\text{вх}}$$

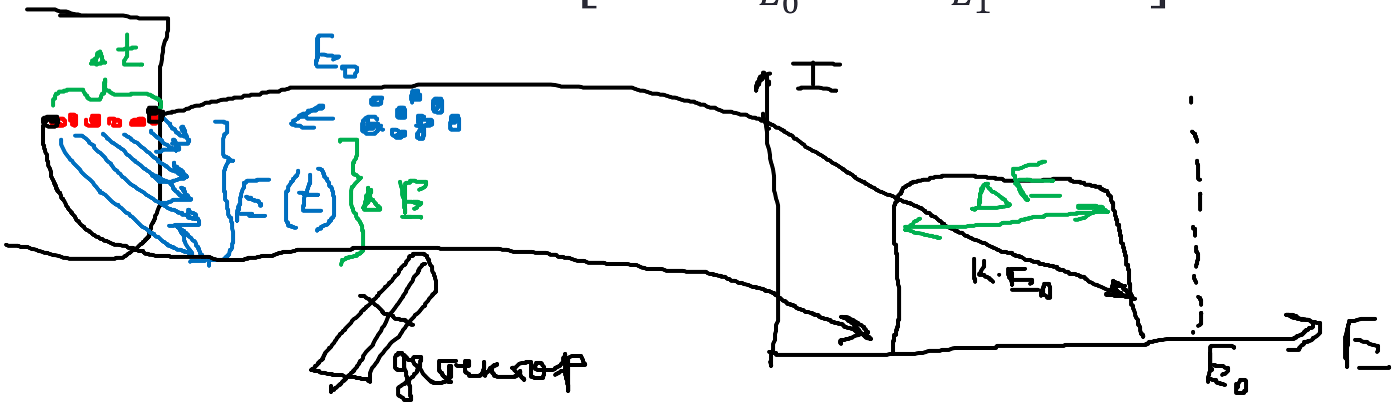
$$\Delta E_s = (1 - K) \cdot E_t$$

$$\Delta E_{\text{вых}} = \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E_1} \cdot \frac{t}{\cos\theta}$$

$$E_1 = E_0 - \Delta E_{\text{вх}} - \Delta E_s - \Delta E_{\text{вых}} = K_{M_2} \cdot E_0 - K_{M_2} \cdot \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E_0} \cdot t - \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E_1} \cdot \frac{t}{\cos\theta}$$

Если атомы мишени одного рода распределены вглубь мишени по толщине Δt, то энергетический спектр обратно отражённых ионов имеет ширину ΔE равную

$$\Delta E = \Delta t \cdot \left[K \cdot \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E_0} + \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E_1} \cdot \frac{1}{\cos\theta} \right] = \Delta t \cdot [S].$$



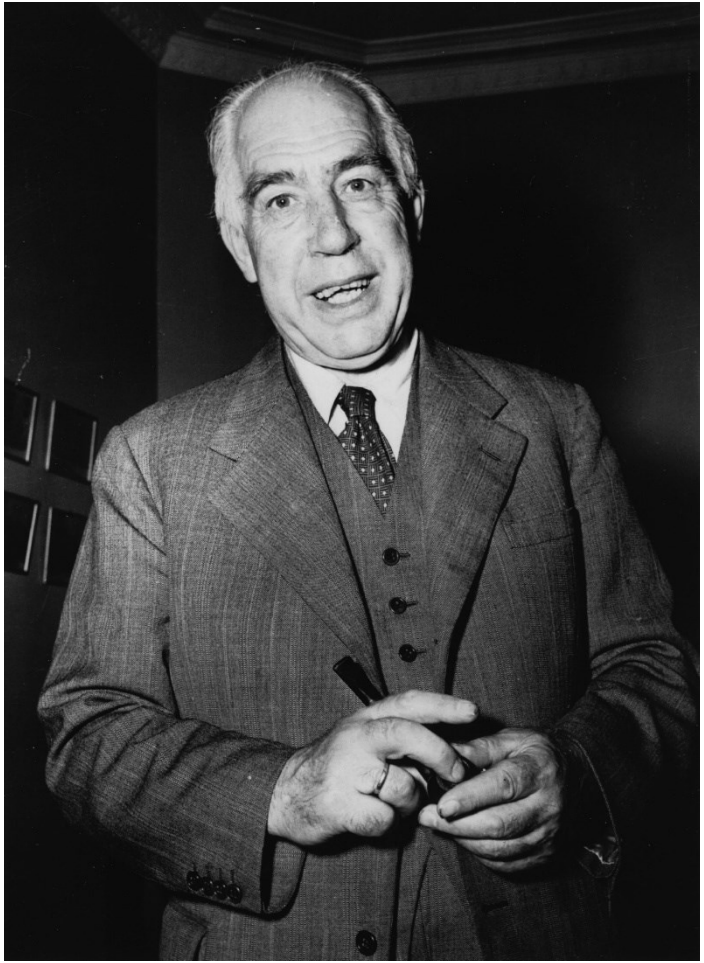
$[S]$ – коэффициент энергетических потерь обратного рассеяния

$$\boxed{[S] = K \cdot \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E=E_{\text{вх}}} + \frac{1}{|\cos\theta|} \cdot \left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{E=E_{\text{вых}}}}$$

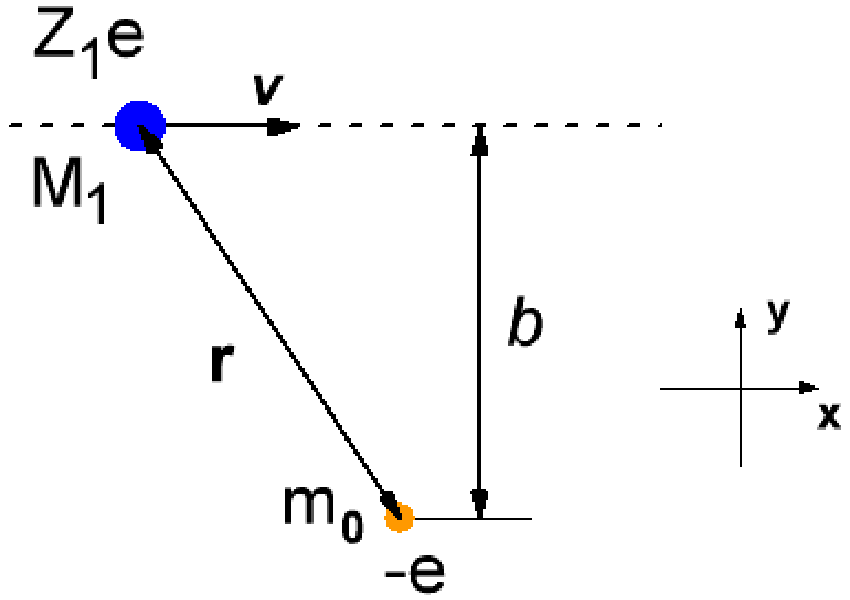
При исследовании тонких приповерхностных слоёв толщиной до 0,5 мкм

$E_{\text{вх}} \approx E_0, E_{\text{вых}} \approx K \cdot \ E_0$

А ты выучил мои постулаты?!



В 1913 г. датский учёный Н. Бор получил формулу для потерь энергии заряженной частицы на основании классических представлений.



$$\int F_x(t)\mathrm{d}t = 0$$

$\Delta p = k_c \frac{2Z_1 e^2}{bv}$ – импульс, полученный электроном.

Энергия электрона, полученная (**T**ransfer) во время столкновения:

$$T = \frac{(\Delta p)^2}{2m_0} = k_c^2 \cdot \frac{2Z_1^2 e^4}{b^2 m_0 v^2}$$

Дифференциальное сечение передачи энергии от T до $T + \mathrm{d}T$

$$\mathrm{d}\sigma(T) = -2\pi b \mathrm{d}b$$

Потеря энергии на единицу длины:

$$-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = n \cdot \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T \mathrm{d}\sigma(T)\,,$$

$n = N \cdot Z_2$ – концентрация электронов, N – концентрация атомов.

$$-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = n \cdot \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T\mathrm{d}\sigma(T) = n \cdot \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} T \cdot 2\pi b \mathrm{d}b = k_c^2 \frac{4\pi n Z_1^2 e^4}{m_0 v^2} \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}$$

Величина $b_{\min}$ выбирается исходя из того, что при лобовом столкновении налетающего иона и электрона атома мишени электрон приобретает максимальную скорость $2v$.

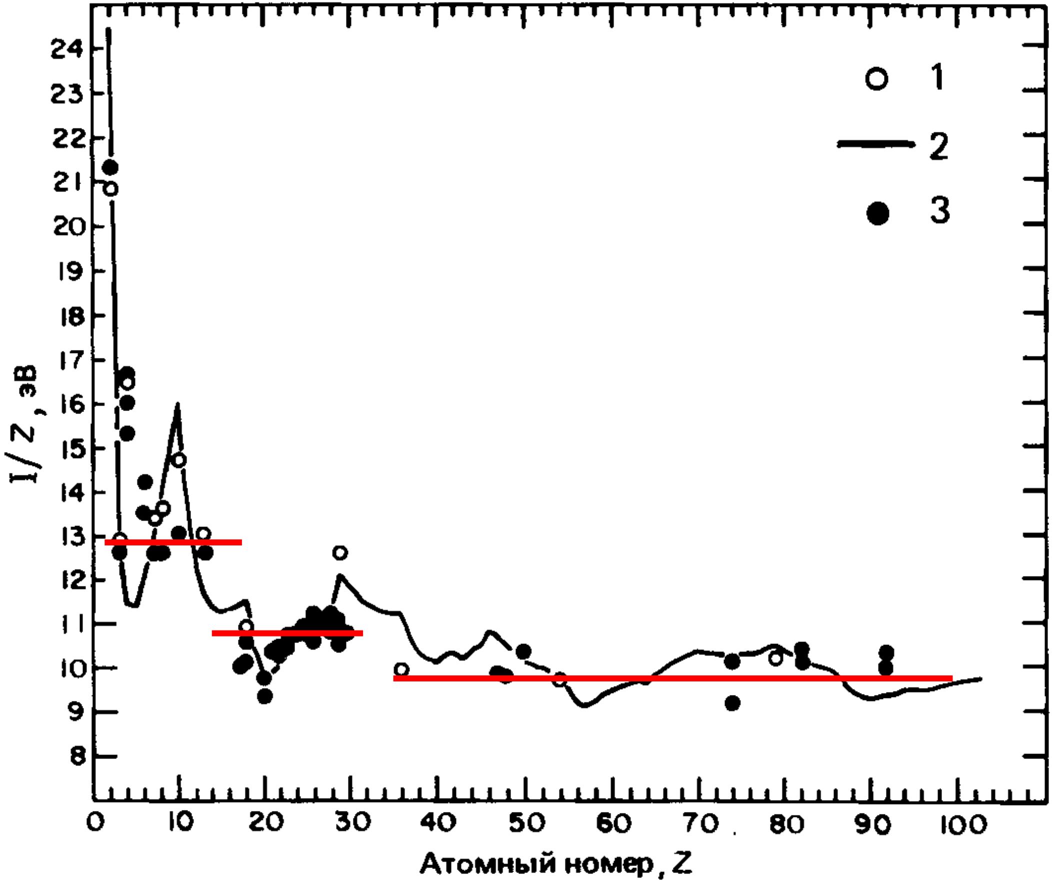
$$T = \frac{1}{2} m_0 (2v)^2 = \frac{(\Delta p)^2}{2m_0} = k_c^2 \cdot \frac{2Z_1^2 e^4}{b_{\min}^2 m_0 v^2} \to b_{\min} = k_c \cdot \frac{Z_1 e^2}{m_0 v^2}$$

Минимальная энергия, которую можно передать электрону, должна обеспечить переход электрона в возбуждённое состояние.

$$T_{\min} = I,$$

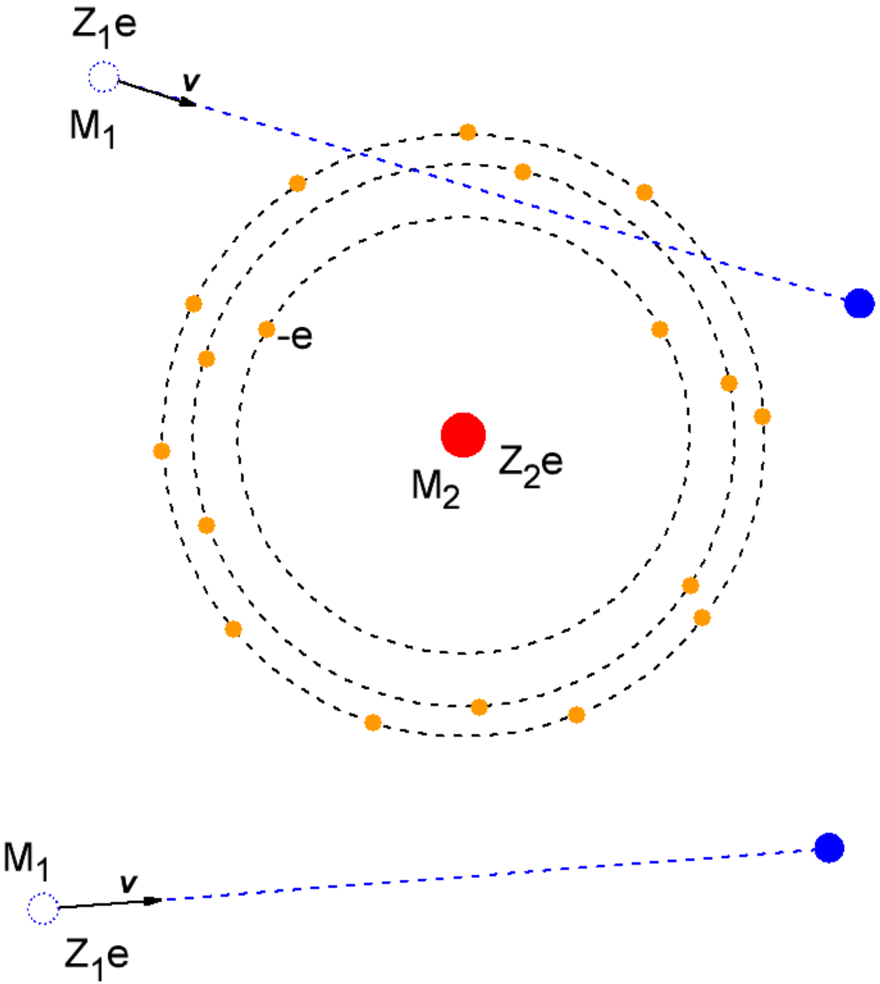
I – средняя энергия возбуждения электрона.

$$T_{\min} = k_c^2 \cdot \frac{2Z_1^2 e^4}{b_{\max}^2 m_0 v^2} = I \rightarrow b_{\max} = \sqrt{k_c^2 \cdot \frac{2Z_1^2 e^4}{I m_0 v^2}}$$



Средняя энергия возбуждения электрона

$$I \approx (10-13) \cdot Z_2 \text{ [эВ]}$$



$$-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}=k_c^2\frac{2\pi Z_1^2e^4n}{m_0v^2}\ln\frac{2m_0v^2}{I}$$

Электронные (неупругие) потери:

$$-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}=k_c^2\frac{2\pi Z_1^2e^4}{E}\cdot NZ_2\cdot\frac{M_1}{m_0}\cdot\ln\frac{2m_0v^2}{I}$$

Сечение торможения $\varepsilon = \frac{1}{N} \cdot \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} \left[\frac{\text{эВ}\cdot\text{см}^2}{10^{15}\ \text{атом}}\right]; \left[\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right] = \left[\frac{\text{эВ}}{\text{Å}}\right]$

$$\boxed{\varepsilon = k_c^2 \cdot \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{E} \cdot Z_2 \cdot \frac{M_1}{m_0} \cdot \ln \frac{4m_0 E}{M_1 I}}$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \varepsilon \cdot N}$$

$$N = \frac{N_A}{M} \cdot \rho$$

ρ – плотность мишени, $[\text{г}/\text{см}^3]$, M – молярная масса, $[\text{г}/\text{моль}]$, $N_A = 6{,}022 \cdot 10^{23}\ \text{атом}/\text{моль}$ – число Авогадро.

Ядерные потери при высоких энергиях

Сечение торможения в случае ядерных (упругих) столкновений рассчитывается аналогично с той лишь разницей, что появляется Z_2, масса $m_0 \to M_2$ и энергия I представляет собой энергию смещения ядра.

$$\boxed{\varepsilon_{\text{ЯД}} = k_c^2 \cdot \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{E} \cdot \frac{M_1}{M_2} \cdot \ln \frac{b_{max}}{b_{min}}}$$

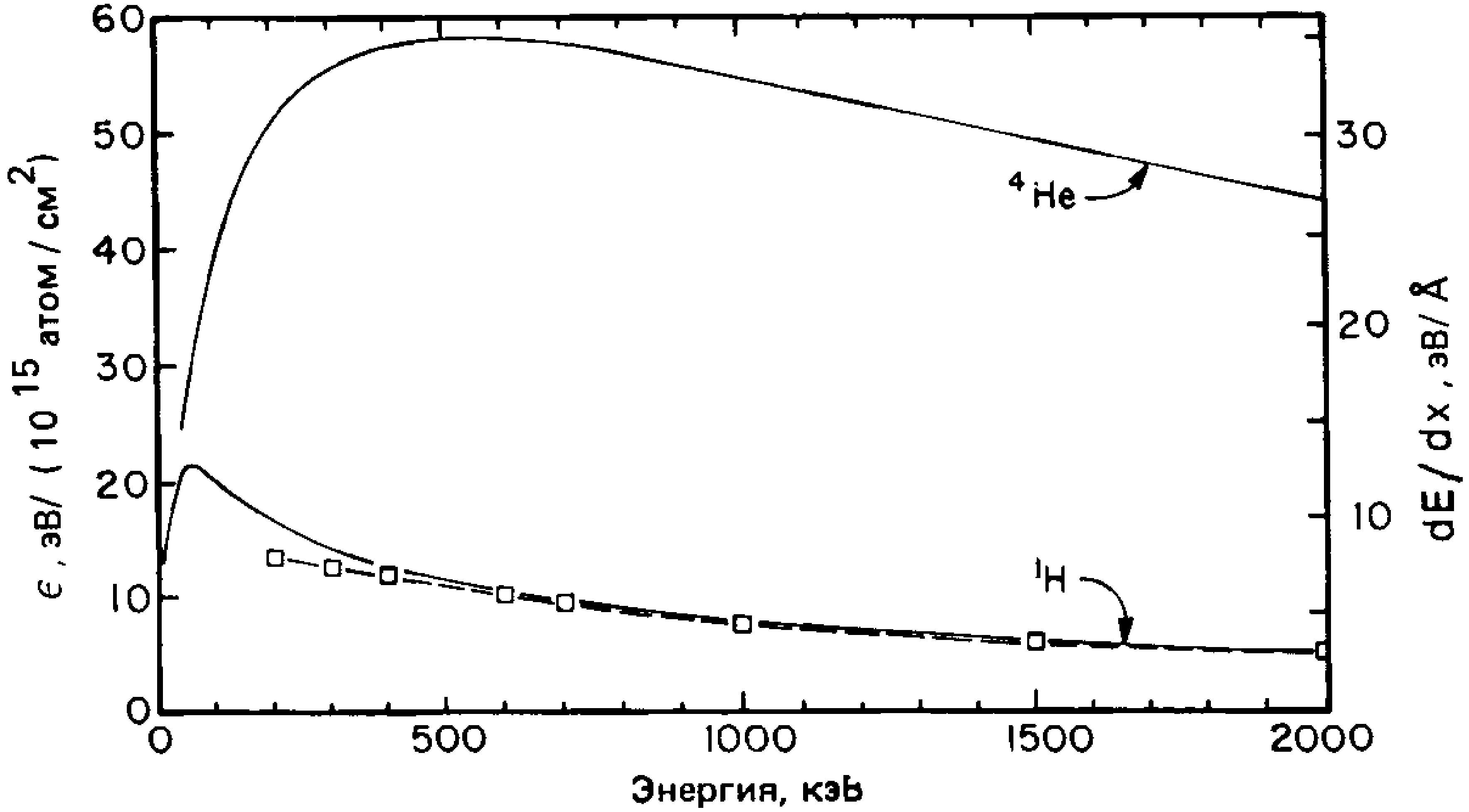
Соотношение между двумя видами потерь

$$\frac{(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_{\text{эл}}}{(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_{\text{яд}}} \approx \frac{1}{Z_2^2} \cdot \frac{M_2}{m_0} \cdot \frac{N \cdot Z_2}{N} = \frac{1}{Z_2} \cdot \frac{M_2}{m_0} \approx \frac{2m_p}{m_0} = 3{,}7 \cdot 10^3,$$

m_p – масса протона ($M_2 \approx (2 - 2{,}5) Z_2 m_p$)

Частица	Масса	
	кг	а. е. м.
Электрон	$9{,}1 \cdot 10^{-31}$	0,00055
Протон	$1{,}67 \cdot 10^{-27}$	1,00728

- При больших энергиях E_0 и малых Z_1 преобладают электронные потери (неупругие столкновения) $(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_{\text{эл}} \gg (\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_{\text{яд}}$.
- При малых энергиях E_0 преобладают ядерные потери (упругие столкновения), однако внешний вид зависимости $(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_{\text{яд}}$ будет отличаться от той, что получена ранее для высоких энергий.


60
50
40
30
20
10
0
ε, эВ/ (10^{15} атом / см^2)
30
20
10
dE / dx , эВ/ Å
^{4}He
^{1}H
0
500
1000
1500
2000
Энергия, кэВ

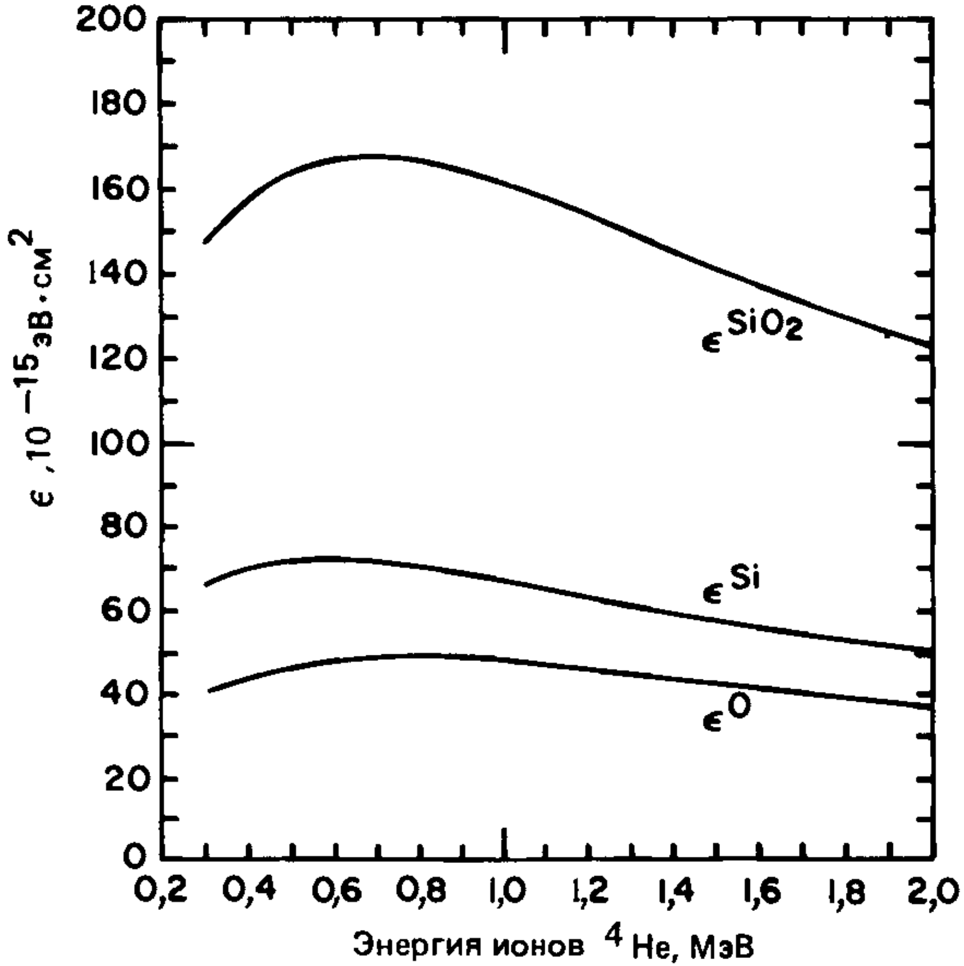
Потери энергии в химических соединениях. Правило Брэгга

При торможении в материале **сложного состава** A_nB_m сечение торможения складывается из сечений торможения от **каждого рода** атомов с **весом**, равным относительному содержанию элементов.

$$\boxed{\varepsilon^{A_nB_m} = n \cdot \varepsilon^A + m \cdot \varepsilon^B}$$

$$\boxed{-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = N_{A_nB_m} \cdot \varepsilon^{A_nB_m}}$$

$$\varepsilon^{SiO_2} = \varepsilon^{Si} + 2\varepsilon^{O}$$



Задача

Пучок ионов гелия $^4He^+$ с энергией 2 МэВ бомбардирует поверхность кварцевой мишени. Рассчитать сечение торможения и скорость потерь энергии.

$$Z_{\text{He}} = 2;\ Z_{\text{O}} = 8;\ Z_{\text{Si}} = 14;$$

$$M_{\text{He}} = 4\ \text{а.е.м.} = 4 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27}\ \text{кг};$$

$$m_0 = 0{,}00055\ \text{а.е.м.} = 9{,}1 \cdot 10^{-31}\ \text{кг};$$

$$M_{\text{O}} = 16\ \text{а.е.м.};\ M_{\text{Si}} = 28\ \text{а.е.м.};$$

$$\rho_{\text{SiO}_2} = 2{,}6\ \text{г/см}^3.$$

Задача

- Ионами гелия $^{4}He^{+}$ с энергией 2 МэВ бомбардируют мишень из сапфира (Al_2O_3), рассчитать глубину, на которой энергия ионов уменьшится на 10 %.