

УДК 543.428

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ ОТ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ

© 2024 г. Д. С. Лукьянцев^а *, А. В. Лубенченко^а, Д. А. Иванов^а,
В. П. Будаев^а, И. Н. Павлов^а, О. Н. Павлов^а, О. И. Лубенченко^а

^аНациональный исследовательский университет “МЭИ”, Москва, 111250 Россия

*E-mail: LukyantsevDS@mpei.ru

Поступила в редакцию 11.05.2023 г.

После доработки 15.05.2023 г.

Принята к публикации 18.05.2023 г.

Предложена новая методика обработки рентгеновских фотоэлектронных спектров, которая основана на модели мишени со стохастическим поверхностным слоем. Смоделированы рентгеновские фотоэлектронные спектры от многослойных многокомпонентных металлических мишеней с неоднородным поверхностным слоем для различных углов зондирования с учетом эффектов затенения поверхности. По усовершенствованной методике анализа поверхности методом РФЭС с угловым разрешением получен послойный фазовый профиль металлических образцов. Результаты подтверждены методом АСМ.

Ключевые слова: наноструктурированная поверхность, фотоэлектронная эмиссия, послойный фазовый анализ, тонкие пленки, РФЭС, АСМ

DOI: 10.56304/S2079562923030259

ВВЕДЕНИЕ

Значительные изменения вида и состава поверхности металлического образца происходят, например, после его плазменной обработки. Они влияют непосредственно на химические и физические свойства материала. При плазменном облучении вольфрамовых, молибденовых и других образцов наблюдается стохастическая кластеризация их поверхности [1, 2]. Материалы с высокоразвитой поверхностью находят широкое применение в ядерных, химических и биомедицинских отраслях.

Для надежного определения функциональных свойств материалов с высокоразвитой поверхностью необходимо проводить комплексное исследование. В дополнение к сканирующей электронной микроскопии возможно применение рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). РФЭС позволяет получить сведения о химическом качественном и количественном составе поверхности, а также определить степени окисления химических элементов. Применение РФЭС с угловым разрешением дает возможность провести химический послойный фазовый анализ поверхности, который заключается в определении толщины приповерхностных слоев образца и порядке их чередования [3]. В основе этого анализа заложена плоскопараллельная модель мишени [4], поэтому его применение становится за-

труднительным при исследовании мишеней с сильно развитой поверхностью.

Исследования показывают, что состав мишени и неоднородность ее поверхности определяют вид рентгеновского фотоэлектронного спектра [5–7]. Ранее, в работе [8] нами получены рентгеновские фотоэлектронные спектры от неоднородных многокомпонентных многослойных мишеней с различным видом поверхностного слоя для нормального вылета фотоэлектронов. Выбраны три модели поверхностного слоя мишени: однородный плоскопараллельный, неоднородные наноструктурированные островковый и стохастический. Выполнено сравнение результатов химического послойного фазового анализа по различным моделям. Если поверхностный слой более ровный и тонкий, то расчет по модели плоскопараллельных слоев мишени показывает отклонение от фактической толщины около 10%. В случае более толстого поверхностного слоя отклонение составляет до 30%. Показано, что модель островковых наноструктур неудачно описывает стохастическую поверхность. Для применения последней модели при обработке рентгеновских фотоэлектронных спектров необходимо ее усовершенствовать, например, ввести разбросы по высотам наноструктур и расстояниям между ними.

В работе [9] раскрываются теоретические предположения, которые приводят к пониманию влияния

неоднородности поверхности на спектральную интенсивность потока фотоэлектронов. При различных углах вылета фотоэлектронов возникают эффекты затенения поверхности. Они представляют собой геометрическую особенность, препятствующую однородной эмиссии фотоэлектронов из затененных участков поверхности в направлении энергоанализатора. Учитывая этот эффект, авторы получили зависимости отношения спектральных интенсивностей при произвольном и нормальном углах для различных углов вылета фотоэлектронов от гофрированной поверхности образца. Однако в работе не приведены рекомендации по расчету плотности потока фотоэлектронов для различных углов вылета от стохастической наноструктурированной поверхности.

В работе [10] при исследовании неоднородных образцов получены поправочные коэффициенты для сферических и цилиндрических наноструктур на поверхности. Они определяются отношением истинной толщины верхнего слоя к кажущейся, полученной в предположении плоскопараллельных слоев мишени. Поправочные коэффициенты рекомендуется принять при исследовании макроскопических и микроскопических неоднородностей сферической или цилиндрической формы на поверхности образца. При этом авторы частично учитывают неровность поверхности, но полностью исключают эффекты ее затенения.

Цель настоящей работы заключается в моделировании рентгеновских фотоэлектронных спектров для различных углов вылета фотоэлектронов от стохастической наноструктурированной поверхности металлического образца с учетом эффектов затенения. Результаты моделирования послужат основой для создания комплексной методики послойного фазового анализа неоднородных многокомпонентных мишеней.

ЭКСПЕРИМЕНТ

В работе исследованы окисленные мишени вольфрама и ниобия. Первый образец изготовлен из вольфрама марки ИТЭР ВМ-П и подвержен плазменной обработке на установке ПЛМ [2]. Второй образец представляет собой тонкую пленку ниобия. Слой ниобия толщиной 100 нм нанесен на окисленную кремниевую подложку методом магнетронного напыления на установке Pfeiffer Vacuum SLS630G. Контролируя время осаждения ниобия, получена необходимая толщина пленки, которая в дальнейшем была подтверждена методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

Химический послойный фазовый состав неоднородных образцов определен неразрушающим методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (РФЭС УР). Рент-

геновские фотоэлектронные спектры получены с помощью модуля электронно-ионной спектроскопии на базе платформы НТ-МДТ Нанофаб-25 в условиях безмасляного сверхвысокого вакуума (10^{-6} Па). На установке использовались рентгеновский источник SPECS X-ray Source XR 50 с магниевым анодом (энергия характеристического излучения 1253.6 эВ) и электростатический полусферический энергоанализатор SPECS Phoibos 225 с аппаратным разрешением 0.78 эВ. Рентгеновские фотоэлектронные спектры записаны в режиме постоянной энергии пропускания энергоанализатора (Fixed Analyzer Transmission (FAT)). Для обзорных спектров энергия замедления в линзе энергоанализатора (E_{pass}) равна 80 эВ. Детальные спектры получены при $E_{\text{pass}} = 20$ эВ. Энергоанализатор калиброван с помощью образцов из чистых Cu, Ag и Au. Угол между направлением рентгеновского луча и направлением визирования энергоанализатора равен 54.7° .

Сведения о рельефе поверхностного слоя пленки ниобия получены с помощью атомно-силового микроскопа NT-MDT NTEGRA. Микроскоп работал в неразрушающем бесконтактном режиме. Резонансная частота кантилевера составляла 325 кГц (гарантированный диапазон 255–410 кГц), типичная постоянная сила 50 Н/м (гарантированный диапазон 20–80 Н/м). Для высокого разрешения выбрано поле сканирования 1000×1000 нм.

ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ В МОДЕЛИ ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНЫХ СЛОЕВ МИШЕНИ

Назовем спектральную плотность потока родившихся в мишени фотоэлектронов и вылетевших из нее под заданным углом функцией вылета фотоэлектронов. Ее можно определить в приближении прямо-вперед (Straight Line Approximation), решая задачу неупругого рассеяния фотоэлектронов в твердом теле [9]. В таком случае особенности упругого рассеяния учитываются введением параметра “длина затухания” (Effective-Attenuation-Length) вместо длины свободного неупругого пробега фотоэлектронов. Фотоэлектроны, рожденные в неоднородном слое с различными кинетическими энергиями, рассеиваются по разным законам. Это явление определено модельным дифференциальным сечением неупругого рассеяния. Также принимается во внимание различие в потерях энергии фотоэлектронов в объеме и на поверхности слоя образца [11]. В расчете рентгеновского фотоэлектронного спектра учитываются дуплетная структура спектральной линии, вид которой определяется функцией Фойгта (свертка функций Гаусса и Лоренца), а также некогерентность рентгеновской пушки.

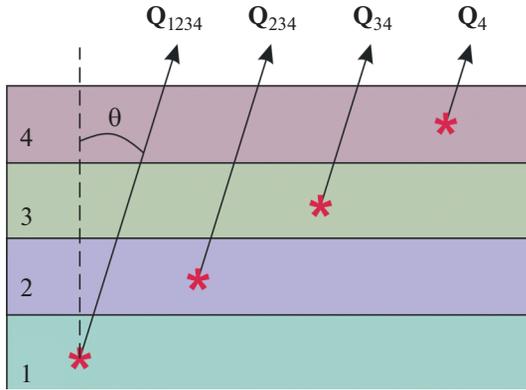


Рис. 1. Модель мишени с плоскопараллельными слоями. Цифрами показана нумерация слоев. Звездочками показаны области рождения фотоэлектронов.

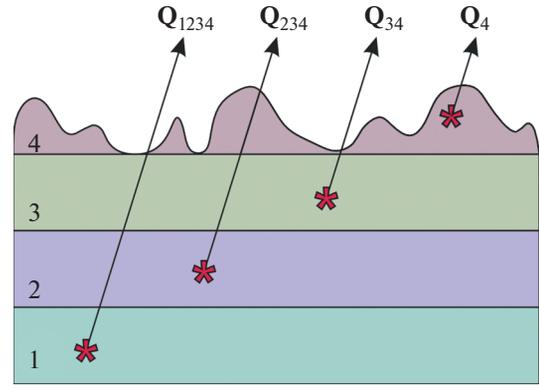


Рис. 2. Модель мишени со стохастическим поверхностным слоем мишени. Цифрами показана нумерация слоев. Звездочками показаны области рождения фотоэлектронов.

Функция вылета фотоэлектронов определяется произведением матричных функций рождения фотоэлектронов и пропускания их сквозь слой материала. Спектральная интенсивность потока фотоэлектронов, рожденных в полубесконечном слое мишени, задается выражением [12, 13]:

$$Q_{inf} = n_0 \omega_{ion}(\gamma) \Lambda_{in} (\mathbf{E} - \mathbf{A})^{-1} \cdot \mathbf{D},$$

где n_0 – атомная концентрация вещества; $\omega_{ion}(\gamma)$ – дифференциальное сечение ионизации, зависящее от угла ионизации γ [14]; Λ_{in} – “длина затухания” (Effective-Attenuation-Length) [15]; \mathbf{E} – единичная матрица размерностью сетки по потерям энергии;

$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nn} \end{bmatrix}$ – матрица Теплица, состав-

ленная из индикатрисы дифференциального сечения неупругого рассеяния x для выбранного химического элемента [11], где n – соответствует выбранной размерности сетки по потерям энергии;

$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1/h \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$ – вектор-столбец дельта-функция

размерностью сетки по потерям энергии, где h – шаг сетки.

Функция пропускания потока фотоэлектронов сквозь однородный плоскопараллельный i -ый слой образца определяется выражением [13]:

$$\mathbf{T}_i = e^{-\frac{d_i}{\Lambda_i \cos(\theta)}} \exp\left(\mathbf{A}_i \frac{d_i}{\Lambda_i \cos(\theta)}\right) \cdot \mathbf{D},$$

где d_i – толщина i -го слоя; \exp – матричная экспоненциальная функция; θ – угол вылета фотоэлектронов, отсчитанный от нормали мишени.

Спектральная интенсивность потока фотоэлектронов от модели мишени с плоскопараллельными слоями (рис. 1) описывается выражением:

$$\begin{aligned} Q_{\Sigma} &= (Q_{1234} + Q_{234} + Q_{34} + Q_4) \cdot \mathbf{D}, \\ Q_{1234} &= Q_{inf1} \cdot \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{T}_3 \cdot \mathbf{T}_4, \\ Q_{234} &= Q_{inf2} \cdot (\mathbf{E} - \mathbf{T}_2) \cdot \mathbf{T}_3 \cdot \mathbf{T}_4, \\ Q_{34} &= Q_{inf3} \cdot (\mathbf{E} - \mathbf{T}_3) \cdot \mathbf{T}_4, \\ Q_4 &= Q_{inf4} \cdot (\mathbf{E} - \mathbf{T}_4), \end{aligned}$$

где Q_{1234} – функция рождения фотоэлектронов в первом слое и их прохождения сквозь слои 2, 3 и 4.

ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ В МОДЕЛИ НЕОДНОРОДНОГО ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ

В настоящей работе предложена модель мишени со стохастическим поверхностным слоем мишени (рис. 2). Принимается, что размеры наноструктур подчиняются нормальному распределению Гаусса. Плотность вероятности распределения высот по поверхности задается тремя параметрами: дисперсией высот наноструктур (σ), средней толщиной (d_{cp}) и максимальной толщиной (d_{max}) и задается формулой:

$$P(d) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(\theta)^2}} e^{-\frac{(d-d_{cp}(\theta))^2}{(2\sigma(\theta))^2}}.$$

Каждый из параметров зависит от угла вылета фотоэлектронов. Также следует учесть условие нормировки плотности вероятности нормального распределения Гаусса:

$$\int_0^{d_{max}} P(z) dz = 1.$$

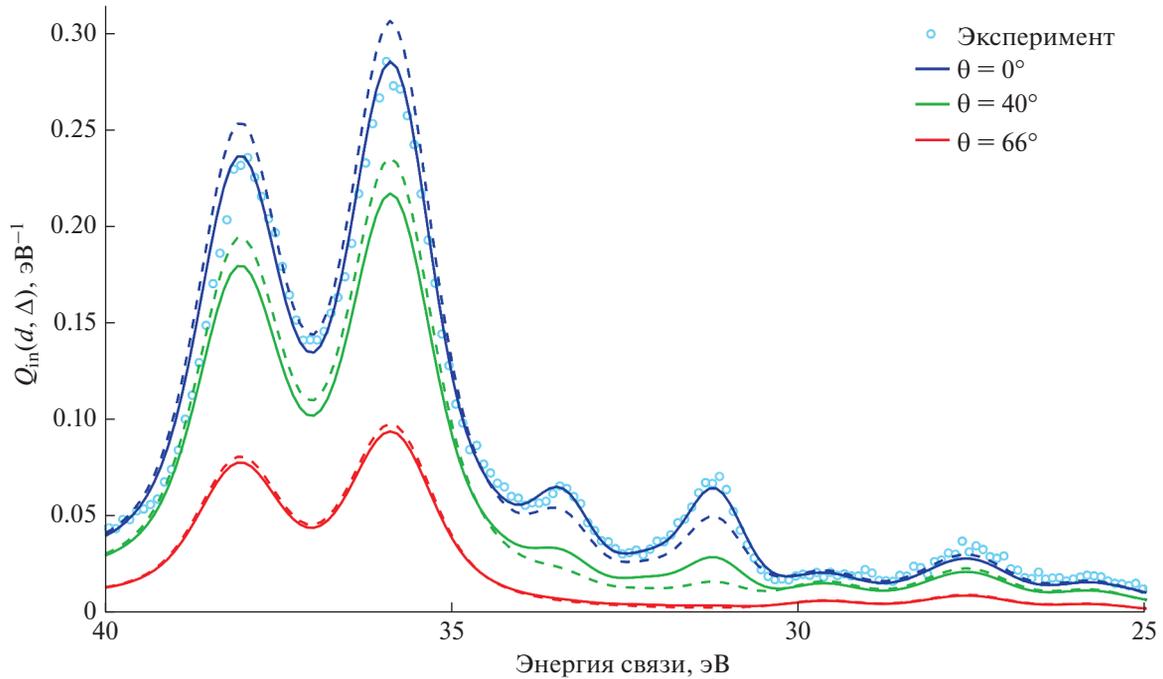


Рис. 3. Рентгеновский фотоэлектронный спектр линии W 4f в диапазоне энергии связи от 25 до 40 эВ. Кружками обозначены экспериментальные данные, сплошной линией – результаты расчета по модели стохастического поверхностного слоя, штриховая – результаты расчета по модели плоскопараллельного слоя. Синим цветом для $\theta = 0^\circ$, зеленым – $\theta = 40^\circ$ и красным – $\theta = 66^\circ$.

В таком случае функция пропускания сквозь стохастический слой определяется интегральным выражением:

$$T_4^*(d_{\max}, \sigma, d_{cp}) = \int_0^{d_{\max}(\theta)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(\theta)^2}} \times e^{-\frac{(z-d_{cp}(\theta))^2}{(2\sigma(\theta))^2}} \exp\left(-\frac{(E-A_4)z}{\Lambda}\right) dz.$$

Функция вылета фотоэлектронов Q_{Σ} от модели мишени со стохастическим поверхностным слоем определяется выражением:

$$\begin{aligned} Q_{\Sigma} &= (Q_{1234} + Q_{234} + Q_{34} + Q_4) \cdot D, \\ Q_{1234} &= Q_{inf1} \cdot T_2 \cdot T_3 \cdot T_4^*, \\ Q_{234} &= Q_{inf2} \cdot (E - T_2) \cdot T_3 \cdot T_4^*, \\ Q_{34} &= Q_{inf3} \cdot (E - T_3) \cdot T_4^*, \\ Q_4 &= Q_{inf4} \cdot (E - T_4^*). \end{aligned}$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Исследование вольфрамового образца. Проведен химический послойный фазовый анализ мишени вольфрама, подвергнувшейся плазменной обработке и в дальнейшем окисленной в атмосфере.

Анализ проводился по моделям плоскопараллельных слоев и стохастического поверхностного слоя мишени. В обзорном спектре обнаружен слабоинтенсивный пик линии C 1s, величина которого позволяет говорить о низком содержании углерода в составе мишени. Поэтому углеводородный слой в расчетных моделях не учитывался.

На рис. 3 приведены рентгеновские фотоэлектронные спектры линии W 4f. Точками обозначены экспериментальные данные при нормальном угле зондирования. Сплошными линиями показан расчет по модели стохастического поверхностного слоя для различных углов вылета фотоэлектронов: синий – $\theta = 0^\circ$; зеленый – $\theta = 40^\circ$; красный – $\theta = 66^\circ$. Пунктирными линиями – расчет по модели плоскопараллельного слоя мишени для углов: синий – $\theta = 0^\circ$; зеленый – $\theta = 40^\circ$; красный – $\theta = 66^\circ$. Экспериментальный спектр нормирован на расчетный для одного угла зондирования.

По результатам расчета получен послойный фазовый профиль мишени (табл. 1). Обнаружен субоксидный переходный нестехиометрический слой W со степенью окисления +1, что соответствует фазе W_2O . Слои 3 и 4 (по модели рис. 2) содержат WO_3 , первый из них плоскопараллельный толщиной 2.6 нм и второй стохастический со средней толщиной 1.5 нм. Параметры неоднородного слоя для нормального вылета фотоэлектронов получены путем расчета спектра по алгоритму

Таблица 1. Послойный фазовый профиль мишени W

Слой	Модель плоскопараллельных слоев		Модель стохастического поверхностного слоя	
	соединение	толщина, нм	соединение	толщина, нм
4	WO ₃	5.0	WO ₃	$d_{\text{cp}} = 1.5; \sigma = 2.1;$ $d_{\text{max}} = 9.0$
3			WO ₃	2.6
2	W ₂ O	0.5	W ₂ O	0.5
1	W	–	W	–

му Левенберга–Марквардта [16]. Толщины слоев, определенные по модели рис. 1, отличаются от значений, полученных по модели рис. 2, практически в два раза. Также стоит обратить внимание на неудовлетворенное описание экспериментальных данных моделью плоскопараллельных слоев.

В результате численного моделирования определена плотность вероятности распределения высот поверхностного слоя для различных углов зондирования (рис. 4). Для подтверждения полученных данных о виде поверхностного слоя необходимо провести эксперимент по записи рентгеновского фотоэлектронного спектра для двух других углов зондирования, а также исследовать поверхность с помощью АСМ и сравнить полученные данные.

Исследование ниобиевой пленки. Для апробации представленной методики анализа рентгеновских фотоэлектронных спектров дополнительно проводилось исследование пленки ниобия толщиной 100 нм. Вначале анализ образца проводился по модели плоскопараллельных слоев мишени. На рис. 5 представлены экспериментальные рентгеновские фотоэлектронные спектры линии Nb 3d и результаты их расчета по модели плоскопараллельных слоев для различных углов вылета фотоэлектронов: синий – $\theta = 0^\circ$; зеленый – $\theta = 40^\circ$; красный – $\theta = 66^\circ$. Точки соответствуют экспериментальным данным. Сплошные линии – результаты расчета по модели плоскопараллельных слоев. Для нормального угла зондирования расчетный спектр довольно хорошо описывает экспериментальный. Полученные параметры слоев для этого случая закладывались в расчетную модель других спектров с учетом изменения угла зондирования. Моделирование показывает, что для углов 40° и 66° расчетный спектр неудовлетворительно описывает экспериментальный. Поэтому полученный химический послойный фазовый состав по этой модели будет отличаться от реального.

На рис. 6 представлены экспериментальные рентгеновские фотоэлектронные спектры линии Nb 3d и результаты их расчета по модели стохастического поверхностного слоя для различных углов вылета фотоэлектронов. Точками показаны экспериментальные данные. Сплошными линиями – расчет по модели стохастического поверхностного слоя. В результате расчета спектров для различных углов определены параметры стохастического поверхностного слоя, которые позволяют добиться надежного описания экспериментальных данных.

Для достоверности определенных параметров неоднородного поверхностного слоя с помощью РФЭС УР выполнено исследование пленки ниобия методом АСМ, в результате которого получе-

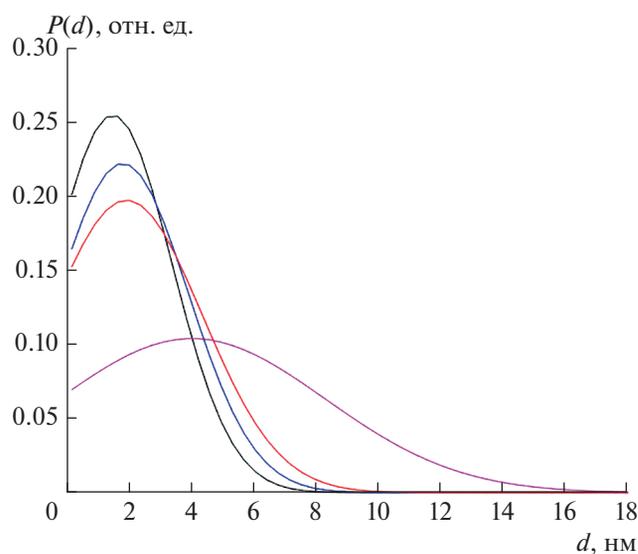


Рис. 4. Плотность вероятности распределения высот на поверхности стохастического слоя для различных углов вылета фотоэлектронов: черный – $\theta = 0^\circ$, синий – $\theta = 30^\circ$, красный – $\theta = 40^\circ$, розовый – $\theta = 66^\circ$.

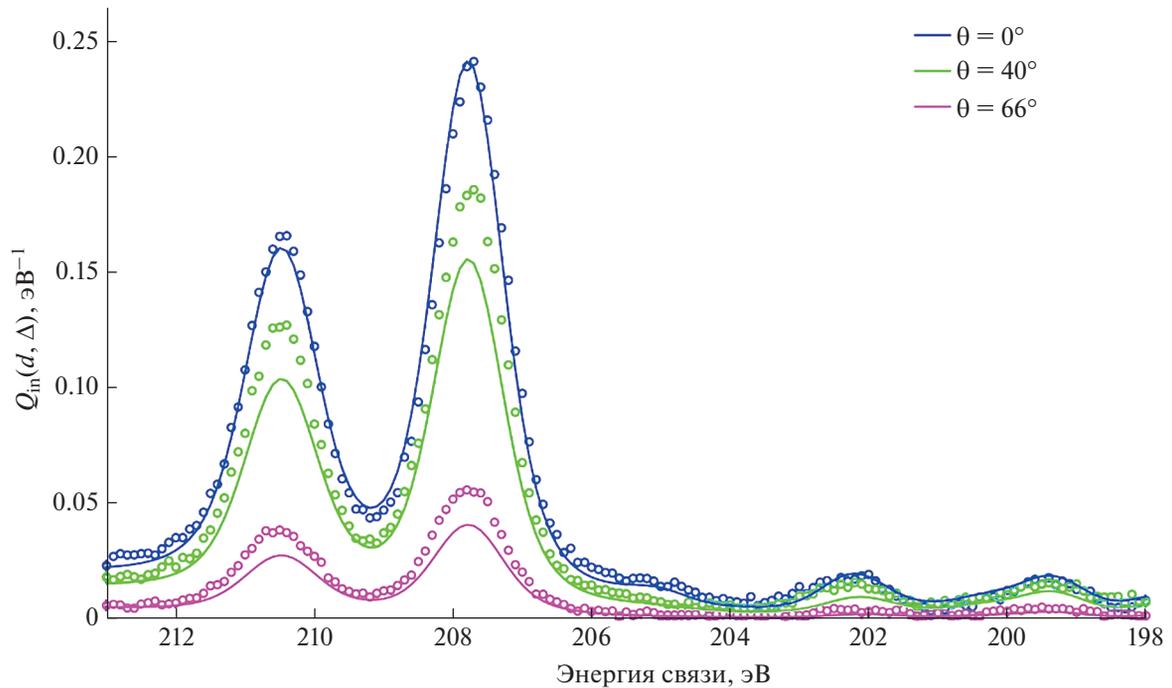


Рис. 5. Рентгеновские фотоэлектронные спектры линии Nb 3d в диапазоне энергии связи от 198 до 213 эВ для различных углов зондирования. Кружками обозначены экспериментальные данные, сплошной линией – результаты расчета по модели плоскопараллельных слоев. Синим цветом для $\theta = 0^\circ$, зеленым – $\theta = 40^\circ$ и красным – $\theta = 66^\circ$.

на карта высот ее поверхности (рис. 7). Численным методом определены длины траекторий фотоэлектронов, вылетевших под разными углами. Результаты рассчитанных функций распределения высот наноструктур на поверхности для различных углов и экспериментальных данных показаны на рис. 8. Точками показаны значения, полученные на основе экспериментальных данных. Сплошными линиями – результаты расчета спектров по стохастической модели мишени. Наблюдается достаточно хорошее совпадение эксперимента и расчета. Также результаты показывают, что случайные неоднородности на поверхно-

сти пленки можно описать функцией нормального распределения Гаусса.

Результаты послойного фазового анализа пленки Nb, выполненного по моделям плоскопараллельных слоев и стохастического поверхностного слоя, сведены в табл. 2. По двум моделями обнаружен поверхностный слой различной толщины, состоящий из Nb₂O₅. Толщина интерфейсного плоскопараллельного слоя Nb₂O₃, рассчитанная по двум моделям, одинаковая. Сравнение результатов показывает, что в случае более толстого неоднородного поверхностного слоя различия в толщи-

Таблица 2. Послойный фазовый профиль мишени Nb

Слой	Модель плоскопараллельных слоев		Модель стохастического поверхностного слоя	
	соединение	толщина, нм	соединение	толщина, нм
4	Nb ₂ O ₅	7.0	Nb ₂ O ₅	$d_{cp} = 0.2; \sigma = 1.9;$ $d_{max} = 9.0$
3			Nb ₂ O ₅	
2	Nb ₂ O ₃	0.5	Nb ₂ O ₃	0.5
1	Nb	—	Nb	—

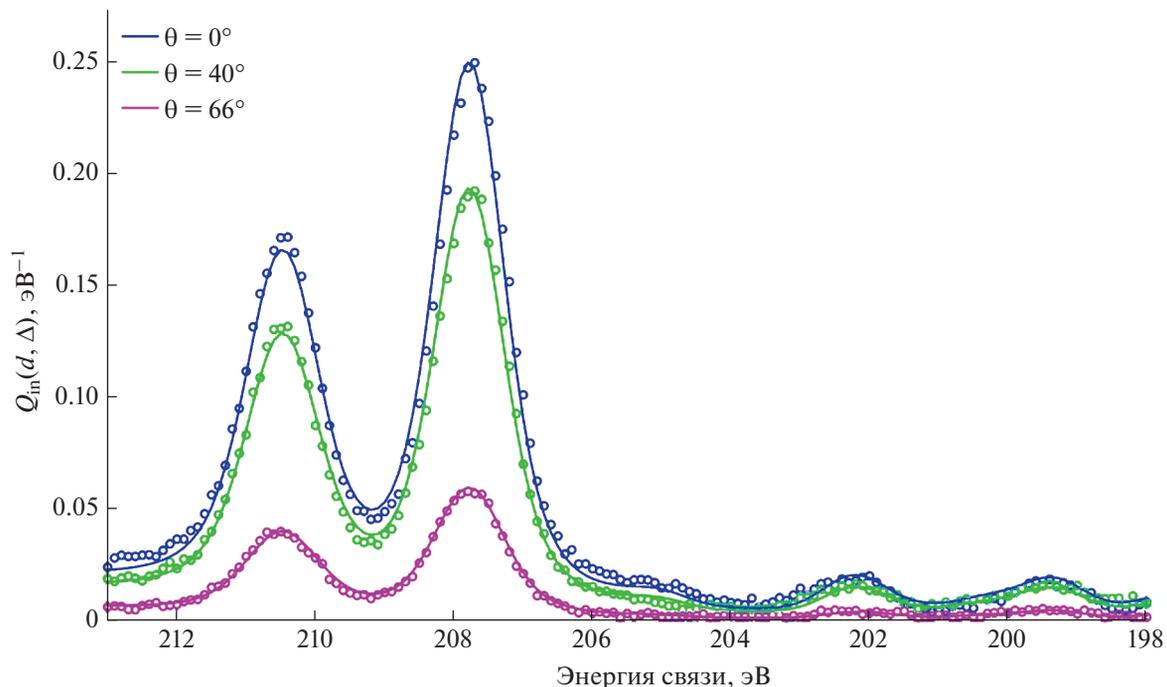


Рис. 6. Рентгеновские фотоэлектронные спектры линии Nb 3d в диапазоне энергии связи от 198 до 213 эВ для различных углов зондирования. Кружками обозначены экспериментальные данные, сплошной линией – результаты расчеты по модели стохастического поверхностного слоя. Синим цветом для $\theta = 0^\circ$, зеленым – $\theta = 40^\circ$ и красным – $\theta = 66^\circ$.

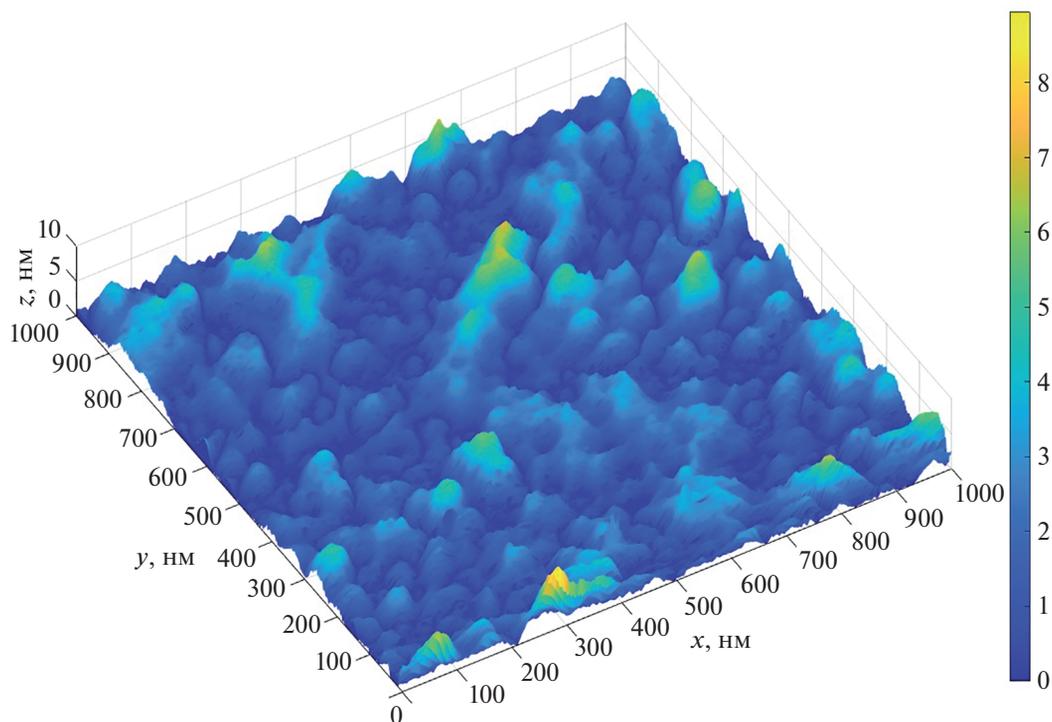


Рис. 7. Карта высот поверхности ниобия, полученная с помощью АСМ.

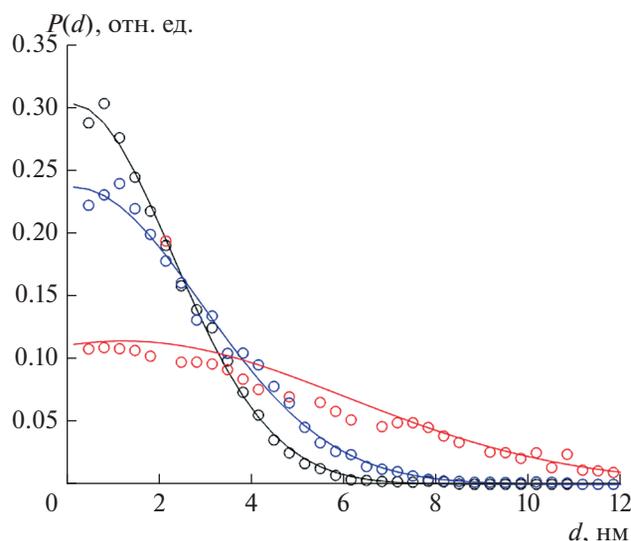


Рис. 8. Плотность вероятности распределения высот на поверхности пленки Nb для различных углов вылета фотоэлектронов: синий – 0°, синий – 40°, красный – 66°. Точками показаны экспериментальные данные. Сплошными линиями – результаты расчета спектров по стохастической модели мишени.

нах, рассчитанных по двум моделям, будут незначительные.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена новая методика обработки рентгеновских фотоэлектронных спектров от мишени с неоднородным поверхностным слоем. Получены рентгеновские фотоэлектронные спектры от многослойных многокомпонентных металлических мишеней со стохастическим поверхностным слоем для различных углов зондирования с учетом эффекта затенения. По усовершенствованной методике анализа исследованы металлические образцы. Приведено сравнение результатов химического послойного фазового анализа, выполненного по различным методикам. Исследование показывает, что использование модели плоскопараллельных слоев для тонких неоднородных поверхностных слоев (<5 нм) приводит к завышенным толщинам при неудовлетворительном описании экспериментального спектра. Параметры неоднородного поверхностного слоя, полученные по новой методике обработки рентгеновских фотоэлектронных спектров, подтверждены с помощью АСМ.

Таким образом, для достоверного определения параметров стохастических поверхностных наноструктур необходимо проводить исследование мишени методом РФЭС с угловым разрешением с использованием как минимум трех различных углов зондирования.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования

Российской Федерации в рамках Государственного задания № FSWF-2023-001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Будаев В.П. и др. // ВАХТ. Сер.: Термоядерный синтез. 2017. Т. 40 (3). С. 23.
2. Budaev V.P. et al. // Fusion Eng. Des. 2021. V. 167. P. 112335.
3. Lubenchenko A.V. et al. // Proc. IV Conf. REEPE. IEEE. 2020. P. 1.
4. Trifonov A.S. et al. // J. Appl. Phys. 2015. V. 117 (12). P. 125704.
5. Varsányi G. et al. // Period. Polytech. Chem. 1987. V. 31 (1–2). P. 3.
6. Martín-Concepción A.I. et al. // Surf. Interface Anal. 2004. V. 36 (8). P. 788.
7. Zemek J. // Anal. Sci. 2010. V. 26 (2). P. 177.
8. Лукьянцев Д.С. и др. // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22 (6). С. 1104.
9. Fadley C.S. et al. // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. 1974. V. 4 (2). P. 93.
10. Shard A.G. et al. // Surf. Interface Anal. 2009. V. 41 (7). P. 541.
11. Lubenchenko A.V. et al. // Appl. Surf. Sci. 2018. V. 427. P. 711.
12. Tougaard S. // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. 2010. V. 178. P. 128.
13. Lubenchenko A.V. et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1370. P. 012049.
14. Yeh J.J. et al. // At. Data Nucl. Data Tables. 1985. V. 32 (1). P. 1.
15. Powell C.J., Jablonski A. // NIST Standard Reference Database 82. 2011.
16. Moré J.J. // Numer. Anal. 1978. V. 630. P. 105.

Numerical Simulation of Photoelectric Emission From a Nano-Structured Surface

D. S. Lukiantsev¹, *, A. V. Lubenchenko¹, D. A. Ivanov¹,
V. P. Budayev¹, I. N. Pavlov¹, O. N. Pavlov¹, and O. I. Lubenchenko¹

¹*National Research University MPEI, Moscow, 111250 Russia*

**e-mail: LukyantsevDS@mpei.ru*

Received May 11, 2023; revised May 15, 2023; accepted May 18, 2023

Abstract—A new method of X-ray photoelectron spectra processing based on a target model with a stochastic surface layer is suggested. On the base of this model, X-ray photoelectron spectra of multilayer multicomponent metallic targets with an inhomogeneous surface layer are obtained for various probing angles considering surface shading effects. A layer-by-layer phase profile of metallic samples is obtained using the advanced method of surface analysis based on angle-resolved X-ray photoelectron spectroscopy. The results are approved by atomic force microscopy.

Keywords: nano-structured surface, photoelectric emission, phase profiling, thin films, XPS, AFM