

团 体 标 准

T/CASAS 055—2026

半导体材料紫外光电子能谱测试方法

Ultraviolet photoelectron spectroscopy test methods for
semiconductor materials

2026 – 09 – 28 发布

2026 – 09 – 28 实施

第三代半导体产业技术创新战略联盟 发 布

目 次

前言..... II

引言..... III

1 范围..... 1

2 规范性引用文件..... 1

3 术语和定义..... 1

4 方法原理..... 1

5 测试要求..... 2

 5.1 实验室环境..... 2

 5.2 测试环境..... 2

 5.3 测试仪器..... 2

6 标准材料..... 2

 6.1 总则..... 2

 6.2 参考标准材料..... 2

 6.3 工作标准材料..... 2

7 样品制备..... 3

 7.1 制备要求..... 3

 7.2 清洁要求..... 3

 7.3 储存要求..... 3

 7.4 样品处理..... 3

8 测试程序..... 3

9 数据处理..... 4

 9.1 试样性能测量结果处理..... 4

 9.2 不确定度来源..... 4

10 数据分析..... 4

 10.1 二次电子截止边分析..... 4

 10.2 价带顶或 HOMO 能级位置分析..... 4

 10.3 导带底或 LUMO 能级位置分析..... 4

 10.4 基于固定终态紫外光电子能谱测试的电子初始态密度分析..... 4

 10.5 基于固定初态紫外光电子能谱测试的迁移率边分析..... 5

11 测试报告..... 5

 11.1 测试材料..... 5

 11.2 测试条件..... 5

 11.3 光电子能谱测试结果..... 5

 11.4 测试人员及日期..... 5

前 言

本文件按照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由第三代半导体产业技术创新战略联盟（CASA）制定发布，版权归CASA所有，未经CASA许可不得随意复制；其他机构采用本文件的技术内容制定标准需经CASA允许；任何单位或个人引用本文件的内容需指明本文件的标准号。

本文件主要起草单位：西安交通大学、中国科学院半导体研究所、西北大学、北京卫星环境工程研究所、中国科学院长春光学精密机械与物理研究所、中国科学院高能物理研究所、陕西测控技术产业研究院有限公司、北京玉研精密仪器有限公司、上海恒益光学精密机械有限公司、常州玉宇电光器件有限公司、北京第三代半导体产业技术创新战略联盟。

本文件主要起草人：陈玉、魏学成、王双、张敏、闫丹、侯潇涵、郭雅丽、张思超、张浩、魏麟欢、童柏豪、刘鑫、毛佳乐、白洁、钟辉、王妍、李振璇、谭奥、王以宁、刘京宜、周嘉杰、张浩业、尚世博、赵亚林、沈自才、黄煜、刘术林、吕永卫、洪才浩、范有余、殷尧平、刘康、高伟。

引 言

半导体材料紫外光电子能谱测试方法旨在建立一套系统、规范的测试流程和技术标准,用于准确进行半导体材料的电子结构精细表征。该技术方法利用紫外光电子能谱测试技术,基于入射能量连续可调、低能无损、高分辨率的测试方法,更好地匹配不同半导体材料的电离截面,获得更强的探测信号,从而建立高灵敏度材料紫外光电子发射能谱,提供典型半导体材料费米能级到价带附近的精细电子态,进而研究典型半导体材料的功函数以及异质结界面的价带偏移情况,定量分析表征半导体材料的表面态及其相关性质。

半导体材料紫外光电子能谱测试方法

1 范围

本文件描述了第三代半导体材料紫外光电子能谱测试的方法，包括目的、原理、要求、标准材料、样品制备、程序、数据处理、报告。

本文件适用于半导体领域常用第三代半导体材料的紫外光电子能谱测试。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 41072—2021 表面化学分析 电子能谱紫外光电子能谱分析指南

3 术语和定义

GB/T 41072界定的术语和定义适用于本文件。

4 方法原理

在高真空条件下，样品表面在低能连续可调的紫外光照射下发生光电子逸出。仪器通过稳定的紫外光源产生不同能量的入射光子，经过准直与能量单色化后照射样品表面，激发出具有特征动能分布的光电子。逸出的光电子在静电透镜中被引出、聚焦并加速进入能量分析器；能量分析器根据电子的动能差异对其进行选择性分离，从而获得对应于能级结构的光电子谱信号。通过记录光电子强度随动能或结合能的变化，并结合入射光子能量，可进一步解析材料的价带顶位置、功函数及表面电子结构特征，为研究表面能级排列与电子输运行为提供依据。

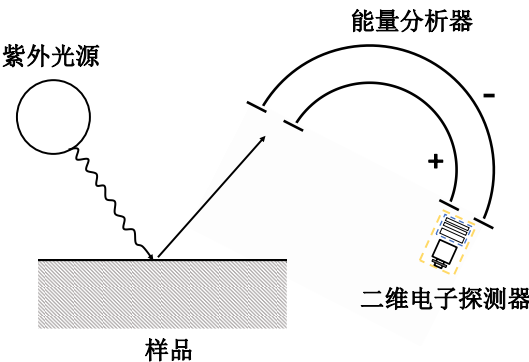


图1 低能连续可调紫外光电子能谱仪原理图

根据紫外光电子发射三步模型理论，结合能 E_B 的出射光电子在入射光子能量为 $h\nu$ 作用下的光发射强度 $N(h\nu, E_B)$ 可表示为公式（1）：

$$N(h\nu, E_B) \propto (h\nu) \left| M_{fi}(h\nu, E_B) \right|^2 D_i(E_B) D_f(h\nu - E_B) X(h\nu - E_B) T(h\nu - E_B) \dots\dots\dots (1)$$

式中：

$N(h\nu, E_B)$ ——结合能 E_B 的出射光电子在入射光子能量为 $h\nu$ 作用下的光发射强度，无量纲；

$h\nu$ ——入射光子能量，单位为电子伏（eV）；

$|M_{fi}(h\nu, E_B)|$ ——电子初始态到最终态的转换系数，无量纲；

$D_i(E_B)$ ——电子初始态密度，无量纲；

$D_f(h\nu - E_B)$ ——电子最终态密度，无量纲；

$X(h\nu - E_B)$ ——电子传输概率，无量纲；

$T(h\nu - E_B)$ ——表面逸出系数，无量纲。

5 测试要求

5.1 实验室环境

除非另有规定，工作区域的环境条件如下：

- a) 温度：15℃~25℃；
- b) 相对湿度：20%~65%。

5.2 测试环境

除非另有规定，测试环境要求如下：

- a) 应在真空环境下测试，通常分析室的本底真空优于 3×10^{-7} Pa；
- b) 样品温度宜为 $20^\circ\text{C} \pm 2^\circ\text{C}$ ；
- c) 外界无强光。

5.3 测试仪器

测试仪器主要组成及要求如下：

- a) 表面分析能量范围（入射光子）：3.2~10eV；
- b) 表面分析能量分辨率（入射光子）： $\leq 0.05\text{eV}$ ；
- c) 光电子能量扫描范围（半球能量分析器）：0~10eV；
- d) 光电子能量扫描分辨率（半球能量分析器）：0.005eV；
- e) 紫外光电子能谱能量分辨率： $\leq 200\text{meV}$ 。

6 标准材料

6.1 总则

一般要求如下：

- a) 宜选用耐用的材料；
- b) 应在干净、清洁的条件下进行处理和存储。

6.2 参考标准材料

参考标准材料要求如下：

- a) 应为用于校准仪器和工作标准的主要标准材料；
- b) 参考标准应追溯到具有管辖权的国家或国际主管部门。

6.3 工作标准材料

工作标准材料要求如下：

- a) 仪器的日常操作中应使用工作标准材料来提供比较曲线以减少数据误差；

- b) 应每年通过测量相对于适当参考标准材料的性能来校准工作标准；
- c) 如出现明显污染，则应对材料进行清洁、更新或更换。

7 样品制备

7.1 制备要求

样品应至少符合以下要求：

- a) 尺寸规格：不小于10mm×10mm；
- b) 应尽可能准确地代表工件；
- c) 对于不同形态的材料需按照GB/T 41072-2021中第6章的规定进行实验前的制备与处理。

7.2 清洁要求

- a) 样品放入真空室前，在不改变样品性能的前提下，可以采用无水乙醇、蒸馏水、清洁空气等进行清洗或吹洗；
- b) 样品放入真空室后，可以采用稀有气体离子（如氩离子）进行处理。

7.3 储存要求

应至少符合以下要求：

- a) 应使用无尘手套进行操作，并样品一般宜储存在真空或充氮存储柜或室温为15℃、相对湿度为20%的干燥柜；
- b) 样品应包装在干净、无尘且无绒的材料中，避免机械损坏；
- c) 有寿命要求的材料，应标明保存期、生产批次等信息。

7.4 样品处理

应使用电荷中和枪中和，去除样品表面所带电荷。

8 测试程序

测试流程如下：

- a) 接通设备电源，紫外激发光源预热约20 min；
- b) 预热期间关闭电子快门，防止测试前紫外光照射样品，使样品表面带电；
- c) 确认测试条件：真空度优于 3×10^{-7} Pa，并记录；
- d) 进行工作标准材料测试，与参考标准材料性能进行对比，校准仪器工作指标，调整并确认仪器处于工作状态；
- e) 把待测样品放置在合适位置，在仪器规定的参数范围内进行测试；
- f) 打开电子快门，使紫外光照射至待测样品处，计算机控制改变单色仪分光波长；
- g) 参考GB/T 41072—2021《表面化学分析 电子能谱 紫外光电子能谱分析指南》，设置偏压，扫描步长等参数，进行紫外光电子能谱测试；
- h) 合理配置电子聚焦透镜及半球能量分析器电压参数，使电子通过半球能量分析器后经微通道板倍增，最终在荧光屏上成像；
- i) 通过工业相机曝光对荧光屏成像进行按电子动能大小分段采集并处理，对图片进行叠加并在相同动能处积分，获取紫外光电子能谱数据；
- j) 更改单色仪分光波长，重复g~i操作，获取不同入射光能量下材料紫外光电子能谱数据；
- k) 为减少测试误差，同一样品至少测试3次；

- l) 测试结束后,将样品移除分析室并存放至干燥柜,关闭单色仪与紫外激发光源;
- m) 进行数据处理与不确定度分析。

9 数据处理

9.1 试样性能测量结果处理

对各次数据取算术平均值并作为测试结果,计算公式见公式(2)。

$$x = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \dots\dots\dots (2)$$

式中:

x ——在某一入射波长辐照下样品的性能测量结果;

x_i ——样品第*i*次测量所得到的测量结果, $i \leq n$;

n ——测量次数, $n \geq 3$ 。

9.2 不确定度来源

测试结果的不确定度主要由测试仪器的不确定度、样品表面的均匀性、测试环境等带来。

10 数据分析

10.1 二次电子截止边分析

二次电子截止边 E_{cutoff} 是二次电子能谱中信号强度趋近基线时对应的能量边界,反映材料表面电子逸出的能量阈值。

具体分析方法,应参考GB/T 41072-2021《表面化学分析 电子能谱 紫外光电子能谱分析指南》。

10.2 价带顶或 HOMO 能级位置分析

价带顶或HOMO能级指材料价带区域的最高能量值,是电子占据态的能量上限,为表征材料电子结构的核心参数。

具体分析方法,应参考GB/T 41072-2021《表面化学分析 电子能谱 紫外光电子能谱分析指南》。

10.3 导带底或 LUMO 能级位置分析

导带底或LUMO能级是导带区域的最低能量值,是空态的能量下限。

具体分析方法,应参考GB/T 41072-2021《表面化学分析 电子能谱 紫外光电子能谱分析指南》。

10.4 基于固定终态紫外光电子能谱测试的电子初始态密度分析

固定终态紫外光电子能谱测试方法利用半球型能量分析器接收固定动能 E_k 的出射光电子,从而使终态相关因子保持恒定,在此条件下 $D_f \cdot X \cdot T$ 为一常数,公式(1)即可简化为公式(3):

$$N(h\nu, E_B) \propto (h\nu) |M_{fi}(h\nu, E_B)|^2 D_i(E_B) \dots\dots\dots (3)$$

式中:

$N(h\nu, E_B)$ ——结合能 E_B 的出射光电子在入射光子能量为 $h\nu$ 作用下的光发射强度,无量纲;

$h\nu$ ——入射光子能量,单位为电子伏(eV);

$|M_{fi}(h\nu, E_B)|$ ——电子初始态到最终态的转换系数,无量纲;

$D_i(E_B)$ ——电子初始态密度,无量纲;

一般情况下，认为材料光学性能对能量依赖与入射光子能量呈函数关系，此处 $|M_{fi}|^2 \propto (h\nu)^{-5}$ 。所以，光发射强度 $N(h\nu, E_B)$ 可表示为公式（4）：

$$N(h\nu, E_B) \propto (h\nu)^{-4} D_i(E_B) \dots\dots\dots (4)$$

由此可得电子初始态密度与实验测得光电子发射强度之间的反演关系，表示为公式（5）：

$$D_i(E_B) \propto (h\nu)^4 N(h\nu, E_B) \dots\dots\dots (5)$$

可以按以下步骤操作，即可重构材料的电子初始态密度 D_i 随能量变化的分布特征：

- a) 扫描不同的入射光子能量获得对应的UPS信号强度；
- b) 每组UPS数据依据公式（5）对各组实验数据进行归一化处理；
- c) 选取固定 E_k ，得到各组处理后曲线中的固定动能点（ $E_B = E_{cutoff} - E_k$ ）；
- d) 将不同入射光子能量条件下的固定动能点进行汇总。

10.5 基于固定初态紫外光电子能谱测试的迁移率边分析

固定初态紫外光电子能谱能够进行固定初态下的光发射强度随入射光子能量的变化测量，其线型分布近似初态的傅里叶分布，可以区分价带顶和间隙态中波函数的不同性质。因此，迁移率边（ E_μ ）的位置能够由固定初态紫外光电子能谱测量确定。

可以按以下步骤操作，即可得到迁移率边位置：

- a) 扫描不同的入射光子能量获得对应的UPS信号强度；
- b) 选取固定初态能量 E_i ，得到各组处理后曲线中的固定初态点（ $E_B = E_{cutoff} + E_i - h\nu$ ）；
- c) 将不同入射光子能量条件下的固定初态点进行汇总；
- d) 如果随着初态能量 E_i 从价带深处向费米能级移动，谱的线形发生显著突变，那么该突变发生的能量区域即对应迁移率边（ E_μ ）的大致范围。

11 测试报告

11.1 测试材料

测试材料的信息应包含但不限于以下内容：

- a) 被测材料的名称；
- b) 被测材料的制备参数（如果有）；
- c) 样品尺寸和厚度、各层的涂层厚度（如果有）、表面轮廓（如果有）等。

11.2 测试条件

测试条件应包含但不限于以下内容：

- a) 测试方法；
- b) 测试日期；
- c) 所用仪器；
- d) 标准材料；
- e) 环境温度和相关湿度；
- f) 样品温度（室温或控制一定温度）；
- g) 在测量过程中发现的任何明显事件应予以记录。

11.3 光电子能谱测试结果

光电子能谱测试结果应包含但不限于以下内容：

- a) 测量值；
- b) 性能平均值（如有）。

11.4 测试人员及日期

测试人员及日期应包含但不限于以下内容：

- a) 测试人员；
 - b) 测试日期；
 - c) 测试单位。
-

