

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

表面電子能譜學之電子非彈性散射截面研究(I)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2215-E-009-080-

執行期間：94 年 08 月 01 日至 95 年 07 月 31 日

執行單位：國立交通大學電子工程學系及電子研究所

計畫主持人：桂正楣

報告類型：精簡報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 9 月 1 日

表面電子能譜學之電子非彈性散射截面研究

Electron Inelastic Scattering Cross Section for Surface Electron Spectroscopy

計劃編號：NSC 94-2215-E-009-080

執行期間：94/08/01-95/07/31

主持人：桂正楣 交通大學電子工程學系教授

一、中文摘要（關鍵詞：電子；非彈性平均自由行徑；表面激發；體激發）

本計劃建立了電子穿越固體表面之微分倒數非彈性平均自由行徑及倒數非彈性平均自由行徑的理論模式，並推導出此二非彈性平均自由行徑與穿越角及離表面距離之關係式。在固體內部及外面的體激發和表面激發均被探討。延伸式德魯特介電模型被用來計算電子穿越銅表面的非彈性平均自由行徑。結果顯示，在固體內部時，無論是微分倒數或是倒數非彈性平均自由行徑都近乎與穿越角或離表面距離無關，其值接近電子在無限大固體內移動的情況，這是因為表面激發的減少大致可與體激發的增加來抵消。而在固體外部時，由於表面激發在靠近表面時較重要，所以微分倒數及是倒數非彈性平均自由行徑都隨穿越角的變大而增加。

英文摘要（關鍵詞：electron, inelastic mean free path, surface excitation, volume excitation）

Theoretical derivations of the differential inverse inelastic mean free path (DIIMFP) and inverse inelastic mean free path (IIMFP) for electrons crossing solid surfaces were made for different crossing angles and electron distances relative to the crossing point at the surface. Individual contributions from volume and surface excitations were separated and analyzed for electrons traveling inside and outside the solid. Extended Drude dielectric functions were employed to calculate the DIIMFP and IIMFP for electrons incident into and escaping from Cu. It was found

that the DIIMFP and IIMFP for electrons moving inside the solid were approximately independent of crossing angle and position of electrons due to the compensation of volume and surface excitations. For electrons moving deep inside the solid, the DIIMFP and IIMFP reduced to the values for electrons moving in an infinite solid. As electrons traveling in the vacuum, the DIIMFP and IIMFP became greater for glancing incident and escaping angles since surface excitations were more probable.

二、計劃緣由與目的

由對物質表面靈敏型之電子顯微鏡所量測到的電子散射能譜，深受電子非彈性散射所影響，因此當移動電子入射一固體物質時，其非彈性散射的定量分析是極為重要的。針對非彈性散射的研究，目前已經有一些理論或實驗方法 [1-7] 被提出來計算非彈性散射截面，然而這些理論及方法並未考慮到移動電子所在空間位置及電子移動方向對非彈性散射截面的影響。當電子以不同的方向穿越固體表面時，在電子的瞬時位置與固體表面穿越點距離相同時，由於其瞬時位置與固體表面的垂直距離不同，這些電子個別受到的激發效應並不同，所以電子與固體之間的非彈性交互作用必須考慮到電子移動方向的影響，亦即，電子非彈性散射截面與電子的入射角度及出射角度有關。

在過往的研究當中，Yubero 的研究團隊探討了包含電子的入射角度及出射角度的表面反彈模型 [8-10]，然而卻沒有考慮電子瞬時位置的影響。而 Jablonski 團隊利用蒙地卡羅程式去模擬電子彈性散射能譜，但是並未考慮方向性及表面效應影響。本計劃的目的就是建立一個考慮電子移動方向的非彈性散射截面模型。

三、研究方法及成果

本計劃從電磁介電理論出發，利用電荷映像法，代入邊界條件去解柏松方程式，而得到在真空之中的感生電位，進而得到感生電場，並配合阻擋本領和感生電場之間的關係，而得電子所受之阻擋本領，然後再利用阻擋本領和微分倒數非彈性平均自由行徑的關係式，得出微分倒數非彈性平均自由行徑，再對頻率做積分就可得倒數非彈性平均自由行徑。

圖(一)及圖(二)為帶有 500 eV 能量的電子以不同角度 (α) 及離表面不同距離 (r) 從銅出射真空的微分倒數非彈性平均自由行徑。當電子在真空時 (圖(一))，整個微分倒數非彈性平均自由行徑都是由表面激發效應所貢獻。在相同角度之下隨著離表面穿越點越遠，或是在離表面穿越點相同距離之下隨著穿越角的變小，微分倒數非彈性平均自由行徑也跟著變小，這是由於離表面越近，表面激發效應越強的緣故。除此之外，圖(一)也顯示出，能量損失高峰的位置與穿越角或離表面穿越點距離都無關。當電子在固體時 (圖(二))，微分倒數非彈性平均自由行徑包括了表面及體激發效應。圖中也顯示微分倒數非彈性平均自由行徑與穿越角的關係較弱，且隨離穿越點距離增加就漸近電子在無限大固體裡面移動的狀況，這是因為表面激發效應只在靠近表面時才會發生。圖(三)及圖(四)為帶有 500 eV 能量的電子以不同角度及離表面不同距離從真空入射銅的微分倒數非彈性平均自由行徑，也可以發現和圖(一)及圖(二)有類似的結果。

圖(五)為帶有 500 eV 能量的電子從銅出射到真空的倒數非彈性平均自由行徑。當電子剛離開表面到達真空部分時 (即 $r > 0, r \approx 0$)，倒數非彈性平均自由行徑快速下降，這意味著表面激發效應只在表面附近才會發生，且隨離表面距離增加而減弱。當電子在固體裡面時，倒數非彈性平均自由行徑近乎一個固定值而與離表面距離或穿越角無關，表示隨離表面距離距離越遠時，體激發效應的增加會被表面激發效應的減少所抵消，因此在固體中的倒數非彈性平均自由行徑就可以利用在無限大固體的值來近似。圖(六) 帶有 500 eV 能量的電子從真空入射到銅的倒數非彈性平均自由行徑，也可以發現和圖(五)有類似的結果。

四、結果與討論

利用電磁介電理論，本計劃推導出與電子位置及移動方向相關的非彈性散射截面模式，並計算了入射及出射銅表面的微分倒數及倒數非彈性平均自由行徑。結果顯示在固體裡面時，此非彈性平均自由行徑深受表面及體激發效應之影響，而隨離表面距離距離越近時，體激發效應的減少會被表面激發效應的增加所抵消，所以在固體裡面的微分倒數及倒數非彈性平均自由行徑可用電子在無限大固體內移動的值來近似。在真空部分時，非彈性平均自由行徑僅受表面激發效應所影響。本計劃的研究成果在表面能譜分析將會有很大的裨益

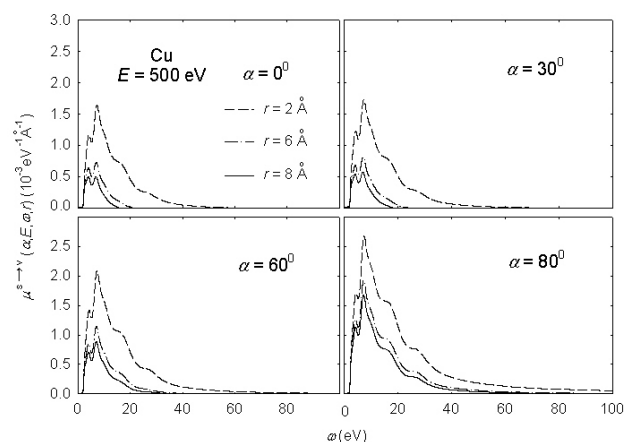
五、參考文獻

- [1] C. J. Tung, Y. F. Chen, C. M. Kwei and T. L. Chou, *Phys. Rev. B* **49**, 16684 (1994).
- [2] Y. F. Chen, P. Su, C. M. Kwei and C. J. Tung, *Phys. Rev. B* **50**, 17547 (1994).
- [3] S. Tougaard and I. Chorkendorff, *Phys. Rev. B* **35**, 6570 (1987).
- [4] Y. F. Chen and C. M. Kwei, *Surf. Sci.* **364**, 131 (1996).
- [5] C. M. Kwei, C. Y. Wang and C. J. Tung, *Surf. Interface Anal.* **26**, 682 (1998).
- [6] C. M. Kwei, S. Y. Chiou and Y. C. Li, *J. Appl. Phys.* **85**, 8247 (1999).
- [7] C. M. Kwei, S. J. Hwang and Y. C. Li, *J. Appl. Phys.* **93**, 9130 (2003).
- [8] F. Yubero and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **46**, 2486 (1992).
- [9] F. Yubero, J. M. Sanz, B. Ramskov and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **53**, 9719 (1996).
- [10] F. Yubero, D. Fujita, B. Ramskov and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **53**, 9728 (1996).
- [11] A. Jablonski, J. Gryko, J. Kraaer and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **39**, 61 (1989).
- [12] A. Jablonski, *Phys. Rev. B* **43**, 7546 (1991).
- [13] A. Jablonski, H. S. Hansen, C. Jansson and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **45**, 3694 (1992).
- [14] A. Jablonski, C. Jansson and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **47**, 7420 (1993).

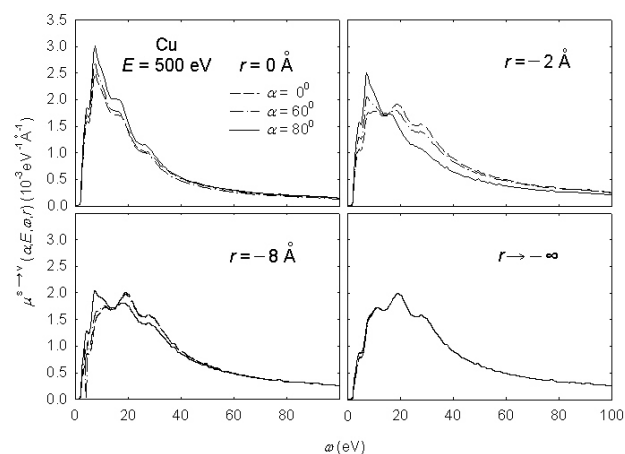
六、相關論文

1. Y. C. Li, Y. H. Tu, C. M. Kwei, C. J. Tung, *Surf. Sci.*, **589**, 67 (2005). (SCI)

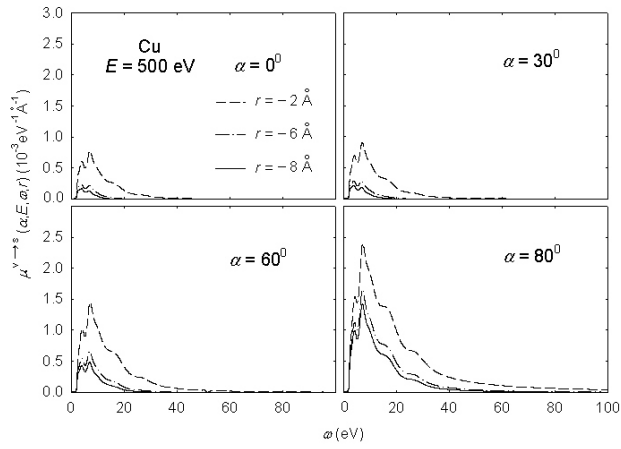
七、圖表



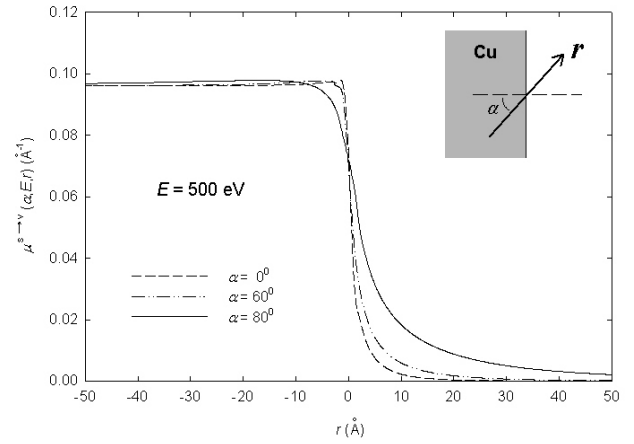
圖(一)針對帶有 500 eV 能量的電子，從銅移動到真空，在不同穿越角及離表面不同距離之下，於真空部分的微分倒數非彈性平均自由行徑。



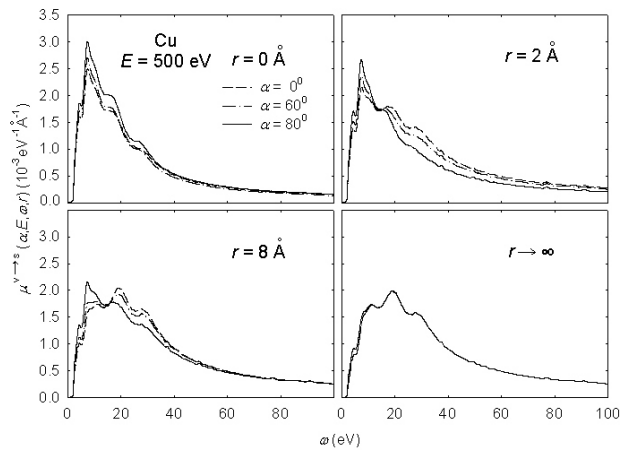
圖(二)針對帶有 500 eV 能量的電子，從銅移動到真空，在不同穿越角及離表面不同距離之下，於銅部分的微分倒數非彈性平均自由行徑。



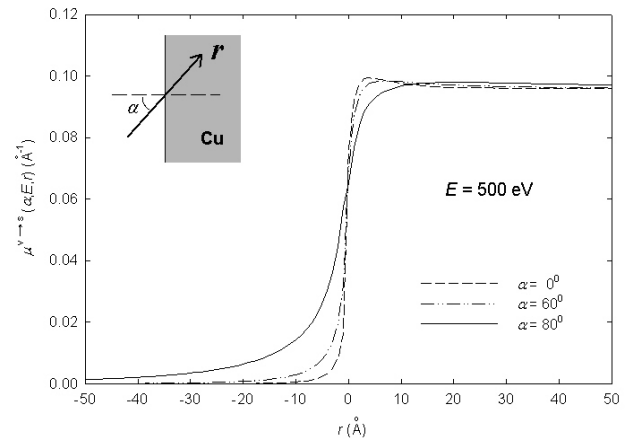
圖(三) 針對帶有 500 eV 能量的電子，從真空移動到銅，在不同穿越角及離表面不同距離之下，於真空部分的微分倒數非彈性平均自由行徑。



圖(五) 針對帶有 500 eV 能量的電子，從銅移動到真空，其倒數非彈性平均自由行徑與離表面距離的關係。



圖(四) 針對帶有 500 eV 能量的電子，從真空移動到銅，在不同穿越角及離表面不同距離之下，於銅部分的微分倒數非彈性平均自由行徑。



圖(六) 針對帶有 500 eV 能量的電子，從真空移動到銅，其倒數非彈性平均自由行徑與離表面距離的關係。