

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

## 彈性波峰電子能譜術之準彈性散射能量損失

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2215-E-009-065-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：國立交通大學電子工程學系

計畫主持人：桂正楣

計畫參與人員：黎裕群

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 9 月 26 日

# 彈性波峰電子能譜術之準彈性散射能量損失

## Quasi-elastic Scattering Energy Losses in Elastic Peak Electron Spectroscopy

計劃編號：NSC 91-2215-E-009-065

執行期間：91/08/01-92/07/31

主持人：桂正楣 交通大學電子工程系教授

### 一、中文摘要：(關鍵詞：準彈性散射，反衝效應，彈性波峰，非彈性自由行徑，表面激發參數)

本計劃探討了電子入射固體作準彈性散射時，反衝效應對電子能量損失的影響。針對金及矽兩種材料，我們利用了蒙地卡羅法，去模擬準彈性反射的電子能量分佈以及其所顯現的反衝偏移和分佈寬度加寬。

在模擬運算中，我們採用含相對論之彈性作用截面、與作用位置有關之非彈性平均自由行徑、表面激發參數、以及由拉賽福散射所致之反衝能量損失。根據蒙地卡羅法之演算過程

，我們並針對準彈性反射電子中的一次散射情況，提出了一個半解析模式。另外，由於固體所處環境溫度會使原子產生熱擾動，此熱效應亦會增加電子能量損失，而加大了反衝偏移及分佈寬度程度。在沒有原子熱擾動的理想狀況下，我們的模式充分地適用在描述準彈性反射的電子能量分佈。

### 英文摘要：(keywords: Quasi-elastic scattering, Recoil effect, Inelastic mean free path, Surface excitation parameter)

The energy distribution of electrons quasi-elastically backscattered from solids has been investigated. Monte Carlo (MC) simulations were performed for the study of the recoil energy shift and the broadening of this distribution for backscattered electrons from Si and Au. In these simulations, electron interaction cross sections were obtained from calculations based on the dielectric response theory for inelastic interactions and elastic interactions. The Rutherford-type recoil energy

was included in the MC simulations by either considering or neglecting the thermal effect of atomic vibrations. Such an effect was applied using the single scattering model. The intensity of electrons quasi-elastically backscattered from Si and Au

was simulated for incident electrons of an energy distribution. The adjustment for the spectrometer energy resolution was allowed. An analytic expression for the intensity of backscattered electrons by a single scattering was derived explicitly. Comparison of simulated results with experimental data was made and discussed.

## 二、計劃緣由與目的

分析由電子入射固體所產生之電子能譜，在研究固體物理性質是非常重要的<sup>1-8</sup>。過去的分析把電子能譜其中的準彈性波峰視為是電子與固體原子彈性碰撞的結果，並沒有涉及能量的損失，而認為彈性散射之電子能量與電子入射固體時之能量相同。但事實上，由電子能譜觀測的結果，準彈性波峰是有能量分佈範圍的<sup>9-12</sup>，這是由於拉賽福反衝能量損失所造成<sup>9</sup>，這種能量損失雖很小，卻不能忽略<sup>10</sup>，這也就是為何要被稱作準彈性波峰的原因。所以本計劃的目的是引入拉賽福反衝能量損失，利用蒙地卡羅法<sup>13-22</sup>去模擬準電子準彈性波峰的能量分佈。

## 三、研究方法及成果

我們利用蒙地卡羅法計算準彈性電子波峰的能量分佈。在模擬過程中，產生介於 0 與 1 之間的隨機數字，透過彈性截面可以決定散射角度及彈性碰撞路徑長度。利用拉賽福反衝效應，計算每一次在電子與原子彈性碰撞之後所剩餘的電子能量。我們用延伸型德魯特介電函數<sup>23</sup>並根據介電理論計算出入射電子情況及出射電子情況的非彈性自由行徑<sup>16,24</sup>，從非彈性自由行徑可得到電子在碰撞過程中保證沒有非彈性碰撞的機率；並利用表面激發參數<sup>25</sup>計算電子在經過固體表面受到表面效應影響的機率。記錄電子在固體內部的運動路徑軌跡以及最終反彈出固體的電子能量，我們可以得出電子入射固體的準彈性波峰能量分佈範圍。

圖（一）及圖（二）分別顯示了由蒙地卡羅法模擬電子入射矽及金固體的結果，模擬的情況是 5000 電子伏特之電子垂直入射固體而接收角是從  $0^0$  到  $90^0$ 。從圖中可以看到，對準彈性電子波峰的貢獻程度隨電子在固體中碰撞次數越多而越少，並且反衝偏移以及分佈寬度加寬的情況也可以很明顯地看出。其中，由金固體所反應出之反衝偏移及分佈加寬的程度比矽固體所反應者較小，這是因為質量較大的原子，其拉賽福反衝能量損失較小。另外在兩圖中，畫了針對電子在固體中只有一次散射情形而推導出的能量分佈模式，可以看出我們的理論推導結果和由蒙地卡羅法所計算的結果非常吻合。又準彈性波峰的形狀主要是根據彈性散射截面而來。

在實際上的準彈性波峰的能量分佈形態是像高斯分佈一樣，這有兩個原因，其中一個原因是由於入射的電子束的能量分布亦是一個高斯分佈。圖（三）畫了 5000 電子伏特電子束垂直入射矽固體並且接收角範圍從  $0^0$  到  $90^0$  的情況，其中實線表電子束的能量分佈半高寬是 0.3 電子伏特，而虛線表電子束的能量分佈半高寬是 0.5 電子伏特。可以看出，圖中的準彈性波峰能量分佈也是呈現高斯分佈，不過，其半高寬比原電子束的半高寬還寬，這是因為受到如圖（一）一般的反衝效應影響。另外一個使準彈性波峰呈高斯分佈的原因是，電子能譜儀能測得電子能量的精確值範圍大小，此範圍被認為也是一個高斯分佈，並定義其高斯分佈的半高寬為電子能譜儀的解析度。圖（四）顯示了當 5000 電子伏特且高斯分佈半

高寬為 0.3 電子伏特的電子束垂直入金固體，而接收角為  $0^0$  到  $90^0$ ，由三個不同電子能譜儀解析度所模擬出來的結果，三個解析度值分別是 0 電子伏特（實線）、0.3 電子伏特（虛線）及 0.5 電子伏特（點狀線）。可以從圖中看出，準彈性波峰是高斯分佈，而且當電子能譜儀解析度值越大，則準彈性波峰的半高寬也越大。從圖（三）及圖（四）的結果我們很明顯地可以得到，真正從反衝效應所貢獻到準彈性波峰半高寬的部分很小，最主要是受到入射電子束高斯分佈半高寬及電子能譜解析度所影響<sup>26-28</sup>。

圖（五）中，我們把實驗結果<sup>29</sup>（虛線）及按照實驗條件的模擬結果（實線）放在一起比較，實驗條件是由 5000 電子伏特且高斯分佈半高寬為 0.4 電子伏特的電子束，以與垂直表面軸夾角  $50^0$  斜向入射矽固體，接收角的範圍是  $0^0$  到  $3^0$ ，而電子能譜解析度設定為 0.28 電子伏特。我們可以看到，實驗數據的反衝位移及半高寬皆比模擬的數值大，這是由於模擬的狀況沒有考慮到固體中原子熱擾動<sup>29</sup>的影響。根據一次電子散射理論及原子的熱擾動速度是呈馬克威爾－波茲曼分佈所推得，此原子熱擾動會使反衝能量損失呈現一個機率分佈，這個範圍分佈也被假設為一個以原子靜止時（即沒有熱擾動）的反衝能量損失為中心的高斯分佈。所以，我們把這種熱效應（室溫時半高寬為 0.3 電子伏特）加入模擬計算中，所得結果以鍊狀線表示，可以看到，與沒有考慮熱效應的情況比較，熱效應影響又加大了準彈性波峰的半高寬，到此我們可以知道，準彈性波峰的半高寬主要是由入射電子束高斯分佈半高寬、電子能譜解析度及熱效應所影響。但是，當計入熱效應的準彈性波峰與實驗數據比較時，反衝位移有些許差距，這是因為熱效應的假設是以原子靜止時所致反衝能量損失為中心的高斯分佈，而真正情況應該是要假設，以原子最可能速度擾動時所致反衝能量損失為中心的高斯分佈才是。

## 四、結果與討論

我們利用蒙地卡羅法模擬了電子能譜中的準彈性波峰的能量分佈。拉賽福反衝能量損失造成了電子準彈性波峰的反衝位移及能量分布寬度加寬，且較重的原子其反衝效應較小。但主要影響電子準彈性波峰能量分佈寬度及形狀的是，入射電子束高斯分佈寬度及電子能譜解析度，所以導致電子準彈性波峰能量分佈亦是一個高斯分佈。另外，由於原子熱擾動的影響，使反衝能量損失亦呈現高斯分佈，這樣又加大了電子準彈性波峰的能量分佈範圍；而在室溫時的原子最可能熱擾動速度，加大了電子準彈性波峰的反衝位移。

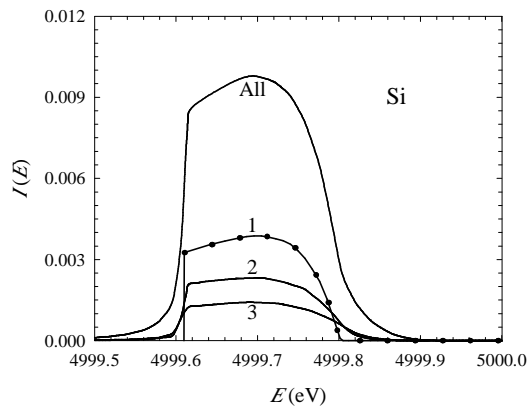
我們的模式很成功地解釋電子能譜中的準彈性波峰的能量分佈情況，且對電子束以不同角度入射固體及以不同角度接收反彈電子的情況都能夠充分地適用。

## 五、參考文獻

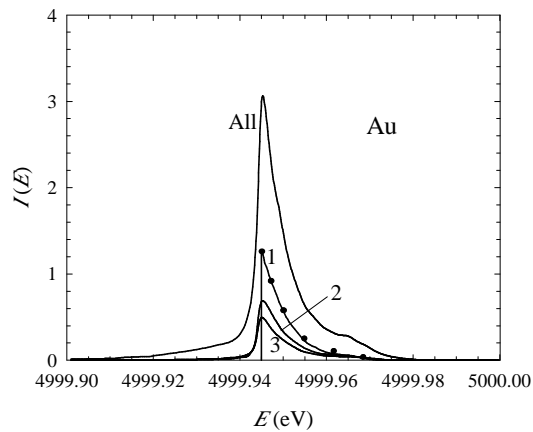
- [1] J. Kirschner and P. Staib, Phys. Lett. **42** 335 (1973).
- [2] J. Kirschner and P. Staib, Appl. Phys. **6** 99 (1975).
- [3] G. Gergely, Surf. Interf. Anal. **3** 201 (1981).
- [4] A. Jablonski, Surf. Sci. **151** 166 (1985).
- [5] B. Gruzza and C. Pariset, Surf. Sci. **247** 408 (1991).
- [6] C. Jardin, G. Gergely and B. Gruzza, Surf. Interf. Anal. **19** 5 (1992).

- [7] W. Dolinski, S. Mröz and M. Zagórski, *Surf. Sci.* **200** 361 (1988).
- [8] H. Beilschmidt, I. S. Tilinin and W. S. M. Werner, *Surf. Interf. Anal.* **22** 120 (1994).
- [9] H. Boersch, R. Wolter and H. Schoenebeck, *Z. Phys.* **199** 124 (1967).
- [10] N. E. Erickson and C. J. Powell, *Phys. Rev. B* **40** 7284 (1989).
- [11] D. Laser and M. P. Seah, *Phys. Rev. B* **47** 9836 (1993).
- [12] K. Goto and R. Shimizu 1997 Proceedings of the International Symposium. Atomic Level Characterization for Materials and Devices '97, Maui, Hawaii, The Microbeam Anal. 141. Comp. Jap. Soc. Promotion Science (1997). p. 403
- [13] Y. F. Chen, C. M. Kwei and P. Su, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **28** 2163 (1995).
- [14] A. Jablonski, H. S. Hansen, C. Jansson and S. Touggard, *Phys. Rev. B* **45** 3694 (1992).
- [15] C. M. Kwei, S. S. Tsai and C. J. Tung, *Surf. Sci.* **473** 50 (2001).
- [16] C. M. Kwei, S. Y. Chiou and Y. C. Li, *J. Appl. Phys.* **85** 8247 (1999).
- [17] A. Jablonski, J. Gryko, J. Kraaer and S. Touggard, *Phys. Rev. B* **39** 61 (1989).
- [18] A. Jablonski, *Phys. Rev. B* **43** 7546 (1991).
- [19] A. Jablonski, C. Jansson and S. Touggard, *Phys. Rev. B* **47** 7420 (1993).
- [20] Y. F. Chen, P. Su, C. M. Kwei and C. J. Tung, *Phys. Rev. B* **50** 17547 (1994).
- [21] C. M. Kwei, P. Su, Y. F. Chen and C. J. Tung, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **30** 13 (1997).
- [22] C. M. Kwei, Y. F. Chen and C. J. Tung, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31** 36 (1998).
- [23] C. M. Kwei, Y. F. Chen, C. J. Tung and J. P. Wang, *Surf. Sci.* **293** 202 (1993).
- [24] Y. F. Chen and C. M. Kwei, *Surf. Sci.* **364** 131 (1996).
- [25] C. M. Kwei, C. Y. Wang and C. J. Tung, *Surf. Interf. Anal.* **26** 682 (1998).
- [26] J. Tóth, D. Varga, I. Cserny, L. Kövér, B. Gruzza, D. Zeze, C. Jardin and G. Gergely, *Vacuum* **50** 473 (1998).
- [27] G. Gergely, M. Menyhárd, Zs. Benedek, A. Sulyok, L. Kövér, J. Tóth, D. Varga, Z. Berényi and K. Tőkési, *Vacuum* **61** 107 (2001).
- [28] A. Sulyok, G. Gergely, M. Menyhárd, J. Tóth, D. Varga, L. Kövér, Z. Berényi, B. Lesiak and A. Kosinski, *Vacuum* **63** 371 (2001).
- [29] D. Varga, K. Tőkési, Z. Berényi, J. Tóth, L. Kövér, G. Gergely and A. Sulyok, *Surf. Interf. Anal.* **31** 1019 (2001).

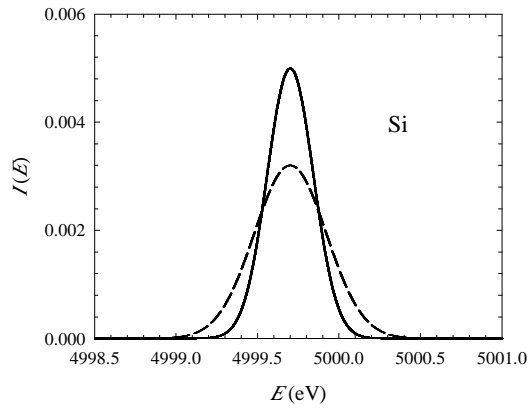
## 五、圖表



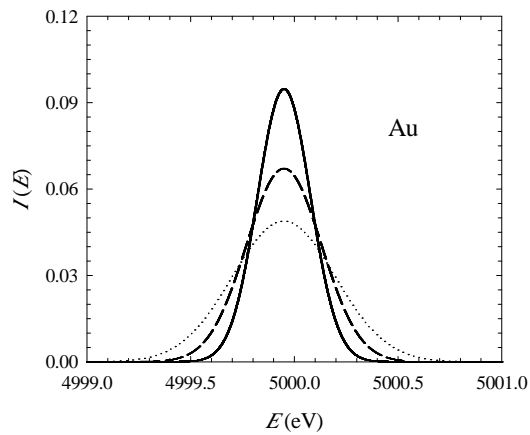
圖(一) 實線表利用蒙地卡羅法模擬電子以 5000 電子伏特能量垂直入射矽固體所得之針對在固體裡頭只有計入一次、二次、三次及全部散射次數的結果。黑點表由理論推導模式針對在固體裡頭只有一次散射所計算之電子準彈性波峰。



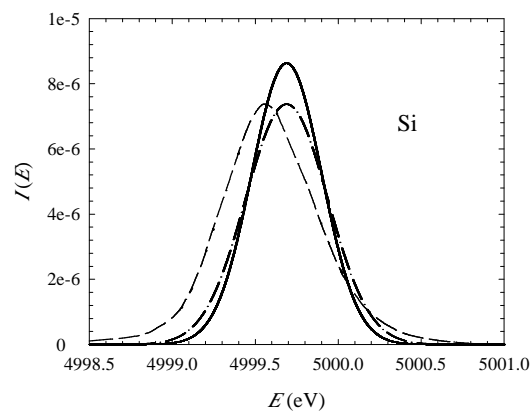
圖(二) 實線表利用蒙地卡羅法模擬電子以 5000 電子伏特能量垂直入射金固體所得之針對在固體裡頭只有計入一次、二次、三次及全部散射次數的結果。黑點表由理論推導模式針對在固體裡頭只有一次散射所計算之電子準彈性波峰。



圖(三) 利用蒙地卡羅法分別模擬能量分佈半高寬為 0.3 電子伏特(實線)及 0.5 電子伏特(虛線)電子束以 5000 電子伏特能量垂直入射矽固體所得之電子準彈性波峰。



圖(四) 利用蒙地卡羅法分別模擬電子能譜儀解析度為 0(實線)、0.3(虛線)及 0.5(點狀線)電子伏特所得之電子準彈性波峰，其中入射電子束是以 5000 電子伏特能量，且能量分佈半高寬為 0.3 電子伏特垂直打入金固體。



圖(五) 利用蒙地卡羅法分別模擬不考慮(實線)及考慮(鍊狀線)熱效應之電子準彈性波峰，其中入射電子束是以 5000 電子伏特能量，能量分佈半高寬為 0.4 電子伏特，且與垂直表面軸傾斜  $50^\circ$  打入矽固體，而電子能譜儀解析度為 0.28 電子伏特且接收角為  $0^\circ$  到  $3^\circ$ 。虛線是由實驗所得之數據<sup>29</sup>。