

01;11  
©1994

## ВЛИЯНИЕ ВИДА ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ВТОРИЧНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ

*А.П.Палов*

Для расчетов интегральных и дифференциальных характеристик вторичной электронной эмиссии (ВЭЭ) из металлов обычно используются следующие подходы: полуэмпирический [1], основанные на использовании техники Монте-Карло [2-3] и решении транспортного уравнения [4-5]. В основе названных методов лежит физическая модель рассеяния электронов в простых металлах, подробно изложенная, например, в [6]. Используемое в модели предположение о распаде плазмона электронного газа на одну электронно-дырочную пару приводит к заметному превышению расчетных значений выхода вторичных электронов над имеющимися экспериментальными данными. Для улучшения соответствия расчетных характеристик ВЭЭ экспериментальным вводятся предположения о распаде плазмона на две и более электронно-дырочные пары, дополнительные полуэмпирические параметры (например, толщина слоя, в котором существуют поверхностные плазмоны) и т.д. [2]. При этом во всех работах [1-6] используется классическое выражение (КВ) для плоского потенциального барьера на поверхности раздела металл-вакуум. Исключение составляет [7], где при расчетах энергетических спектров вторичных электронов для коэффициента прохождения применено квантово-механическое выражение (КМВ) и получено отличное от случая с КВ энергетическое распределение отраженных электронов. Абсолютные же значения интегральных коэффициентов ВЭЭ не приведены.

Цель данной заметки — показать, что использование КМВ для потенциального барьера в сочетании с простейшей физической моделью рассеяния электронов в простых металлах позволяет получать расчетные интегральные коэффициенты ВЭЭ в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными, без введения каких-либо полуэмпирических параметров.

Расчет характеристик ВЭЭ для алюминия проводился на основе метода последовательных соударений с использованием техники Монте-Карло и физической модели

электронного рассеяния в металлах, представляющей собой развитие опубликованной ранее [8]. В модели предполагалось, что металл состоит из электронного газа с хаотично распределенными в нем ионными остовами и, соответственно, существуют следующие каналы рассеяния электрона: упругое рассеяние на ионном остове и ионизация его внутренних оболочек, возбуждение электронно-дырочных пар и объемных плазменных колебаний электронного газа. Учитывалось также, что в неупругих процессах (в том числе и при распаде объемных плазмонов) генерируются вторичные электроны.

Для описания упругого рассеяния электрона на ионном остове было использовано выражение для двойного дифференциального сечения:

$$\frac{d^2\sigma}{dx d\phi} = \frac{1}{K^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin \delta_l \exp(i\delta_l) P_l(x) \right|^2, \quad (1)$$

где  $x = \cos \theta$ ,  $\phi$  — полярный и азимутальный углы рассеяния электрона;  $P_l(x)$  —  $l$ -й полином Лежандра;  $\delta_l$  — фазовые сдвиги, расчет которых проводился на основе метода фазовых функций [9] со сферически-симметричным потенциалом ионного остова [10]. Обратная длина свободного пробега вычислялась интегрированием (1) по  $\phi$  от 0 до  $2\pi$  и  $x$  от -1 до 1.

Моделирование потерь энергии и импульса электрона при ионизации остова проводилось в рамках симметричной теории бинарных соударений на основе двойного дифференциального сечения:

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon dP} = \frac{2\pi m e^4 N_i}{(E + 2U_i) v_i P^4}, \quad (2)$$

где  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона,  $N_i$  — количество электронов на  $i$ -ой оболочке,  $U_i$  — энергия связи электрона на  $i$ -ой оболочке,  $v_i = \sqrt{(2 \cdot U_i/m)}$ ;  $\epsilon$ ,  $P$  — энергия и импульс, теряемые электроном в процессе ионизации,  $E$  — энергия налетающего электрона. Энергия первичного электрона после акта ионизации принималась равной  $E^{(1)} = E - \epsilon$ , вторичного —  $E^{(2)} = \epsilon - U_i + E_f$  ( $E_f$  — энергия Ферми); угловые характеристики электронов определялись на основе (2) и закона сохранения импульса. Обратная длина  $\lambda_{ion}^{-1}$  свободного пробега рассчитывалась интегрированием (2) по  $P$  от  $(2m \cdot (U_i + \epsilon))^{1/2} - (2m \cdot U_i)^{1/2}$  до  $(2m \cdot (U_i + \epsilon))^{1/2} + (2m \cdot U_i)^{1/2}$  и по  $\epsilon$  от  $U_i$  до  $E - E_f$ .

Потерянная энергия и изменение волнового вектора налетающего электрона после возбуждения электронно-дырочной пары (ЭДП) электронного газа рассчитывались на основе двойного дифференциального сечения

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon dq} = \frac{1}{\pi a_0 E q} \text{Im} \{ -\varepsilon_{\text{пхф}}(\varepsilon, q)^{-1} \}, \quad (3)$$

где  $a_0$  — первый борковский радиус,  $\varepsilon_{\text{пхф}} = \varepsilon_1 + i \cdot \varepsilon_2$  — комплексная диэлектрическая проницаемость электронного газа, полученная в приближении хаотических фаз,  $q$  — изменение волнового вектора налетающего электрона. Энергия первичного электрона принималась равной  $E^1 = E - \varepsilon$ , ЭДП —  $E^{(2)} = \varepsilon + E_f \cdot R$ , для  $\varepsilon \geq E_f$  и  $E^{(2)} = E_f + R \cdot \varepsilon$ , для  $\varepsilon < E_f$ ;  $R$  — случайное число, равномерно распределенное в интервале (0,1). Угловые характеристики электрона и ЭДП определялись из (3) и закона сохранения импульса. Обратная длина свободного пробега вычислялась интегрированием (3) по  $\hbar q$  от  $(2m \cdot (E_f + \varepsilon))^{1/2} - (2m \cdot E_f)^{1/2}$  до  $(2m \cdot (E_f + \varepsilon))^{1/2}$  и по  $\varepsilon$  от 0 до  $E - E_f$ .

Для описания возбуждения плазмона электронного газа использовалось дифференциальное сечение:

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{1}{a_0 E q} \cdot \frac{1}{\hbar \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon = \varepsilon(q)}}, \quad (4)$$

где  $\varepsilon = \varepsilon(q)$  — дисперсионное соотношение для плазменных колебаний электронного газа, получаемое из уравнения  $\varepsilon_1(\varepsilon, q) = 0$ . Обратная длина  $\lambda_{pl}^{-1}$  свободного пробега рассчитывалась интегрированием (4) по  $\hbar q$  от  $(2m \cdot (E + \varepsilon))^{1/2} - (2m \cdot E)^{1/2}$  до  $\hbar q_c$ , где  $q_c$  есть решение системы уравнений  $\varepsilon = \varepsilon(q)$  и  $\varepsilon = (q \cdot q) + (2 \cdot q \cdot K_f)/2m$ . При описании распада плазмона использовалось модельное предположение о рождении одной ЭДП с энергией, равной  $E^{(2)} = E_f \cdot R + \varepsilon$ , и вектором скорости, изотропно распределенным в телесный угол  $4\pi$ .

Для описания выхода электрона с поверхности металла использовалось КМВ для коэффициента прохождения границы металл-вакуум:

$$K(E, \theta, A) = 4 \frac{\cos \theta \sqrt{E} \cdot \sqrt{E \cos^2 \theta - E_f - A}}{\left[ \cos \theta \sqrt{E} + \sqrt{E \cos^2 \theta - E_f - A} \right]^2},$$

$$E \cos^2 \theta > E_f + A;$$

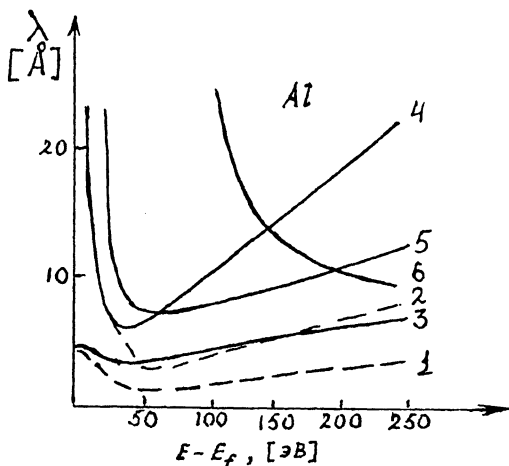


Рис. 1. Зависимость длин свободного пробега электрона от энергии: 1 —  $\lambda_{tot}$ , 2 —  $\lambda_{in}$ , 3 —  $\lambda_{el}$ , 4 —  $\lambda_{eh}$ , 5 —  $\lambda_{pl}$ , 6 —  $\lambda_{ion} \cdot \frac{1}{10}$ .

$$K(E, \theta, A), \quad E \cos^2 \theta \leq E_f + A, \quad (5)$$

где  $A$  — работа выхода электрона с поверхности металла,  $\theta$  — полярный угол относительно нормали к поверхности металла. В классическом же случае  $K(E, \theta, A) = 1$ , если  $E \cdot \cos^2 \theta > E_f + A$ . При моделировании электронных траекторий общая обратная длина свободного пробега принималась равной  $\lambda_{tot}^{-1} = \lambda_{el}^{-1} + \lambda_{ion}^{-1} + \lambda_{eh}^{-1} + \lambda_{pl}^{-1}$ , для неупругих процессов  $-\lambda_{in}^{-1} = \lambda_{tot}^{-1} \lambda_{el}^{-1}$ . Рассчитанные длины свободных пробегов как в упругом, так и в неупругих процессах для Al приведены на рис. 1.

На основе изложенной модели были проведены расчеты энергетических спектров отраженных электронов, коэффициентов неупругого отражения  $\eta$  электронов (при  $A = 50$  эВ) и общего выхода электронов  $\sigma$  (при  $A = 4.15$  эВ) для Al. При этом использовалось как классическое, так и квантово-механическое выражение для потенциального барьера на поверхности раздела металл-вакуум. Полученные с учетом КМВ зависимости от энергии электронного пучка  $E_p$  практически не отличались от полученных ранее [8] с учетом КВ. Использование же КМВ для расчета  $\sigma(E_p)$  существенно уменьшило ( $\sim$  до 20%) получаемые с учетом КВ для потенциального барьера значения  $\sigma$  (рис. 2) и заметно приблизило расчетные значения  $\sigma(E_p)$  к данным эксперимента. Получаемые с учетом КМВ для потенциального барьера энергетические спектры истинно вторичных электро-

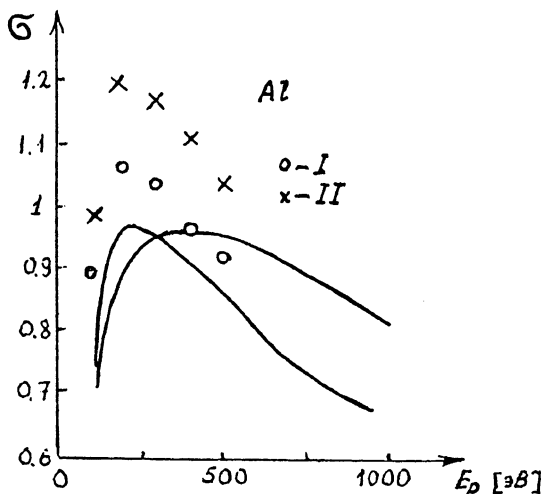


Рис. 2. Зависимость общего выхода электронов с поверхности Al от энергии электронного пучка  $E_p$ . Расчет: I — с учетом КМВ, II — учетом КВ. Эксперимент: 1 — [11], 2 — [12].

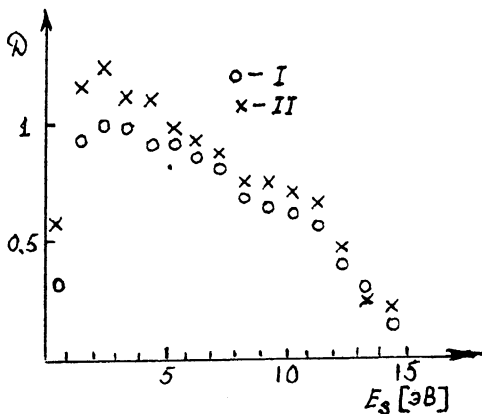


Рис. 3. Энергетическое распределение истинно вторичных электронов при  $E_p = 300$  эВ. Расчет: I — с учетом КМВ, II — с учетом КВ.  $D$  — отношение количества электронов в интервале  $\Delta F_s = 1$  эВ к их пиковому значению при расчетах ВЭЭ с КМВ для потенциального барьера.

нов также лучше соответствуют экспериментальным значениям, чем их классический аналог (рис. 3).

Проведенные расчеты вторично-эмиссионных характеристик позволяют предположить, что изложенная модель вполне адекватно отражает истинные механизмы формирования выхода вторично-эмиссионных электронов, а использование КМВ для потенциального барьера позволяет обойтись без введения полуэмпирических параметров.

Дальнейшее совершенствование модели, по всей видимости, связано с введением динамической поправки на локальное поле в выражение для диэлектрической проницаемости электронного газа и учетом междузонных переходов.

### Список литературы

- [1] *Schou J.* // Scanning Microscopy. 1988. V. 2. N 2. P. 607-632.
- [2] *Ganachaud J.P., Cailler M.* // Surf. Sci. 1979. V. 83. P. 498-518.
- [3] *Ding Z.J., Shimizu R.* // Surf. Sci. 1988. V. 197. P. 539-555.
- [4] *Bindi R., Lanteri H., Rostaing P.* // J. Phys. D. 1980. V. 13. P. 267-280.
- [5] *Rösler M., Brauer W.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1981. V. 104. P. 161-175.
- [6] *Rösler M., Brauer W.* // Springer Tracts in Modern Physics. 1991. V. 122. P. 1-65.
- [7] *Kaneko T.* // Surf. Sci. 1990. V. 237. P. 327-336.
- [8] *Palov A.P., Pletnev V.V., Tel'kovskii V.G.* // J. Nucl. Mat. 1992. V. 196-198. P. 816-818.
- [9] *Calogero F.* Invariable Phase Approach to Potential Scattering. Academic Press, New York, 1967.
- [10] *Smrčka L.* // Czech. J. Phys. 1970. V. 132. P. 291.
- [11] *Бронштейн И.М., Фрайман Б.С.* Вторичная электронная эмиссия. Москва: Наука, 1969.
- [12] *Thomas S., Pattinson E.B.* // J. Phys. D. 1970. V. 93. P. 349.

Институт физики  
Земли им. О.Ю.Шмидта  
Борок

Поступило в Редакцию  
2 ноября 1993 г.