

О МОДЕЛИРОВАНИИ ВТОРИЧНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ ИЗ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

© А.П.Палов

Для расчетов интегродифференциальных характеристик вторичной электронной эмиссии (ВЭЭ) из металлов обычно используют технику Монте-Карло или решают транспортное уравнение [1–8]. В основе названных методов лежит физическая модель взаимодействия электронов с металлами, в которой предполагается, что металл состоит из ионных остовов, хаотично распределенных в невзаимодействующем электронном газе. Если в данную модель при расчетах не вводятся подгоночные параметры (вероятность о распаде плазмона на 1 или 2 электронно-дырочные пары; толщина слоя, в котором существуют поверхностные плазмоны и т. д.), то рассчитываемые интегральные характеристики ВЭЭ могут отличаться на 50–70% от экспериментальных данных [2,3].

Цель данной заметки — показать, что, дополняя общепринятую модель электронного рассеяния в металле [3] учетом обменно-корреляционного взаимодействия между электронами электронного газа (ЭГ), можно заметно (до $\approx 15\%$ на примере алюминия) приблизить рассчитываемые интегральные характеристики ВЭЭ к экспериментальным результатам без введения каких-либо эмпирических параметров.

Для расчетов интегродифференциальных характеристик ВЭЭ из Al использовался метод Монте-Карло. Каждый акт упругого и неупругого столкновения электрона моделировался отдельно. Предполагалось, что металл состоит из ионных остовов, хаотично распределенных во взаимодействующем ЭГ, и соответственно учитывались следующие каналы электронного рассеяния в металле: упругое рассеяние на ионном остоле и ионизация его внутренних оболочек, возбуждение электронно-дырочных пар (ЭДП) и объемных плазмонов ЭГ. Кроме того, учитывалась генерация вторичных и Оже-электронов.

Для расчетов полярного θ и азимутального φ углов упругого рассеяния электрона с волновым вектором k использовано точное решение задачи о рассеянии электрона

Длины свободных пробегов электрона до упругих и неупругих взаимодействий в алюминии:

$E - E_f$ эВ	$\lambda_{tot},$ Å	$\lambda_{el},$ Å	$\lambda_{eh},$ Å	$\lambda_{pl},$ Å	$\lambda_{ion1},$ Å	$\lambda_{ion2},$ Å
5	4.02	4.48	39.05			
7	3.61	4.23	24.79			
9	3.26	3.99	17.92			
11	2.97	3.78	13.88			
16	2.53	3.48	9.26			
24	1.91	3.35	6.01	17.20		
30	1.71	3.41	5.32	9.53		
43	1.71	3.64	5.68	7.43		
58	1.83	3.91	6.62	7.22		
61	1.86	3.96	6.82	7.22		
78	2.03	4.25	8.04	7.54		
103	2.28	4.68	9.92	8.21	352.11	
106	2.30	4.73	10.14	8.28	323.63	
163	2.83	5.59	14.53	10.02	191.94	1818.18
213	3.27	6.29	18.41	11.57	179.21	1298.70
263	3.68	6.93	22.30	13.09	179.86	1176.47
313	4.07	7.55	26.20	14.57	184.84	1136.36
363	4.45	8.15	30.10	15.97	191.94	1146.36
438	5.00	9.00	35.97	18.08	204.50	1162.79

на сферически-симметричном потенциале ионного остова:

$$\frac{d^2 \lambda_{el}^{-1}}{d\alpha d\varphi} = \frac{n}{2\pi k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin \delta_l \exp(i\delta_l) P_l(-\alpha) \right|^2, \quad (1)$$

где λ_{el} — длина свободного пробега (ДСП) электрона до упругого взаимодействия; $\alpha = -\cos(\theta)$; n — концентрация ионных остовов в металле; $P_l(\alpha)$ — l -й полином Лежандра; δ_l — фазовые сдвиги, расчет которых проводился на основе метода фазовых функций [9] с потенциалом ионного остова [10]. Для вычисления λ_{el} выражение (1) интегрировалось по α от -1 до 1 и φ от 0 до 2π .

Изменения импульса ΔP и энергии ΔE электрона при ионизации i -й оболочки остова определялись на основе симметричной теории бинарных соударений:

$$\frac{d^2 \lambda_{ion}^{-1}}{d(\Delta E) d(\Delta P)} = \frac{2\pi n^2 e^4 n N_i}{p_i (E - W + 2U_i) (\Delta P)^4}, \quad (2)$$

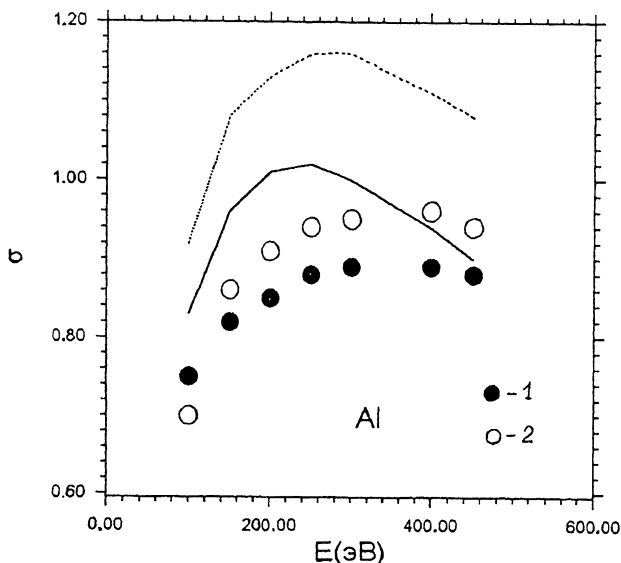


Рис. 1. Общий выход электронов в зависимости от энергии электронного пучка. Расчетные значения, полученные для газа не- и взаимодействующих электронов: штриховая и сплошная линии соответственно. Эксперимент: 1 — [13], 2 — [14].

где λ_{ion} — ДСП электрона до ионизации i -й оболочки остова; e и m — заряд и масса электрона; N_i — количество электронов на i -й оболочке; U_i — энергия связи электрона на i -й оболочке относительно уровня вакуума; $p_i^2 = 2mU_i$; E — энергия налетающего электрона в металле; $W = E_f + A$; E_f — энергия Ферми; A — работа выхода электрона с поверхности металла. Энергия первичного электрона после акта ионизации принималась равной $E_1 = E - \Delta E$, вторичного — $E_2 = \Delta E - U_i + W$. Угловые характеристики электронов при известных ΔP и ΔE рассчитывались из закона сохранения импульса. Для каждой оболочки остова λ_{ion} рассчитывались интегрированием (2) по ΔP от $\sqrt{2m(U_i + \Delta E)} - p_i$ до $\sqrt{2m(U_i + \Delta E)} + p_i$ и по ΔE от $U_i - A$ до $E - E_f$. Предполагалось также, что каждый акт ионизации сопровождается рождением LVV Оже-электронов с изотропно распределенным в пространстве вектором скорости.

Описание возбуждения электронно-дырочных пар и объемных плазмонов во взаимодействующем ЭГ проводилось с использованием комплексной диэлектрической проницае-

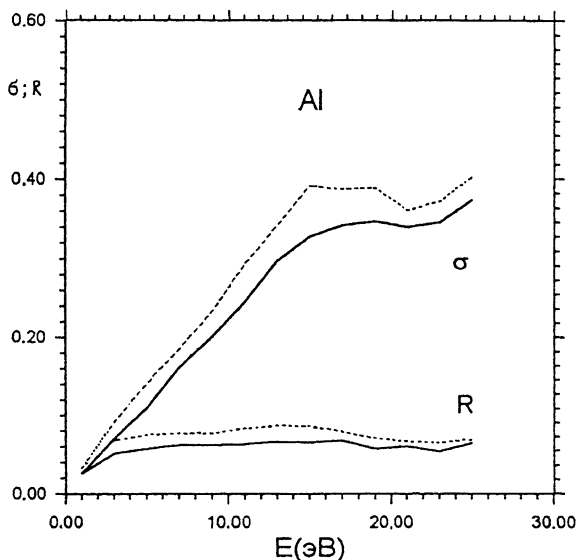


Рис. 2. Коэффициент упругого отражения (R) и общий выход (σ) электронов, рассчитанные для низкоэнергетичных электронных пучков для газа не- и взаимодействующих электронов (штриховые и сплошные линии соответственно).

мости (ДП) ЭГ:

$$\varepsilon(x, y) = 1 + \frac{\varepsilon_{\text{ПХА}}(x, y) - 1}{1 - G(x, y)^* [\varepsilon_{\text{ПХА}}(x, y) - 1]}, \quad (3)$$

где $\varepsilon_{\text{ПХА}}$ — ДП, полученная в приближении хаотических фаз (ПХА); x и y — потерянные электроном во взаимодействии с ЭГ импульс и энергия, нормированные на импульс и энергию Ферми; $G(x, y)$ — динамическая поправка на локальное поле [11], учитывающая парное обменно-корреляционное взаимодействие электронов ЭГ.

Потери энергии и импульса пробного электрона при возбуждении ЭДП и объемного плазмона во взаимодействующем ЭГ рассчитывались в первом борновском приближении:

$$\frac{d^2 \lambda_{eh}^{-1}}{dx dy} = \frac{1}{\pi a_0 Z x} \text{Im} \left\{ -\varepsilon(x, y) \right\}^{-1}, \quad (4)$$

$$\frac{d \lambda_{pl}^{-1}}{dx} = \frac{1}{a_0 Z x} \left\{ \left[\frac{\partial \text{Re} \varepsilon(x, y)}{\partial y} \right]_{y=y^*(x)} \right\}^{-1}, \quad (5)$$

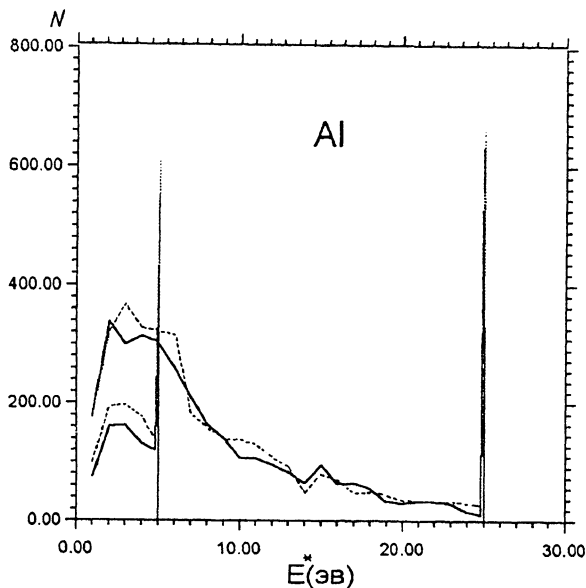


Рис. 3. Энергетические спектры отраженных электронов с энергией пучка 5 и 25 эВ, рассчитанные для газа не- и взаимодействующих электронов (штриховые и сплошные линии соответственно). Количество отраженных электронов приведено в расчете на 10 000 падающих на поверхность металла электронов. E^* — энергия отраженных электронов.

где λ_{eh} и λ_{pl} — ДСП электрона до возбуждения электронно-дырочной пары и объемного плазмона в ЭГ: $Z = E/E_f$; a_0 — первый боровский радиус; $y = y^*(x)$ — дисперсионное соотношение для объемных плазмонов взаимодействующего ЭГ. После акта возбуждения ЭДП энергия первичного электрона принималась равной $E_1 = E - \Delta E$, ЭДП — $E_2 = \Delta E + E_f$. Угловые характеристики первичного электрона и ЭДП при известных из (4,5) ΔP и ΔE рассчитывались из закона сохранения импульса. λ_{eh} вычислялась интегрированием (4) по x от $x_1 = \sqrt{1+y} - 1$ до $x_2 = \sqrt{1+y} + 1$ и y от 0 до $Z - 1$; λ_{pl} — (5) по x от решения уравнения $x = \sqrt{Z} - \sqrt{Z - y^*(x)}$ до решения уравнения $y^*(x) = x^2 + 2x$.

При моделировании электронных траекторий ДСП электрона принималась равной

$$\lambda_{tot}^{-1} = \lambda_{el}^{-1} + \lambda_{ion}^{-1} + \lambda_{eh}^{-1} + \lambda_{pl}^{-1}. \quad (6)$$

Рассчитанные по формулам (1)–(6) значения λ_{tot} , λ_{el} , λ_{ion} , λ_{eh} и λ_{pl} в зависимости от энергии электрона над уровнем Ферми для Al приведены в таблице.

Для описания выхода электрона с поверхности металла было использовано модельное выражение для потенциального барьера $V(r) = -W/(1 + \exp(-fr))$ с $f = 1.5a_0^{-1}$ для Al [12], для которого коэффициент отражения может быть записан в виде

$$R(k_1, k_2, W) = \begin{cases} \left(\frac{\operatorname{sh} \pi(k_1 - k_2)/f}{\operatorname{sh} \pi(k_1 + k_2)/f} \right)^2 & T > W, \\ 1 & T < W, \end{cases} \quad (7)$$

$$k_1 = \sqrt{2mT/\hbar^2}, \quad k_2 = \sqrt{2m(T - W)/\hbar^2}, \quad T = E^* \cos^2 \beta,$$

где β — полярный угол относительно нормали к поверхности металла.

На основе изложенной модели были проведены расчеты энергетических спектров отраженных электронов, коэффициентов упругого отражения (R) и общего выхода (σ) электронов с поверхности Al с использованием как ПХА, так и ДП, рассчитанной по формуле (3) (штриховые и сплошные линии на рис. 1–3 соответственно). Как видно из рис. 1 и 3, учет взаимодействия электронов в ЭГ заметно (до $\approx 15\%$) приближает рассчитываемые значения σ к экспериментальным данным, энергетические же спектры слабо отличаются друг от друга. Отсутствие характерного пика [13] в расчетных значениях R в области низких (1–10 эВ) энергий электронов (рис. 2) объясняется отсутствием учета в предложенной модели генерации поверхностных плазмонов.

Дальнейшее развитие модели, по всей видимости, будет связано с последовательным учетом возбуждения электроном поверхностных плазменных колебаний ЭГ.

Список литературы

- [1] Ganachaud J.P., Cailler M. // Surf. Sci. 1979. V. 83. P. 498.
- [2] Rosler M., Brauer W. // Phys. Stat. Sol. (b). 1981. V. 104. P. 161.
- [3] Rosler M., Brauer W. // Springer Tracts in Modern Physics. 1991. V. 122. P. 1.
- [4] Ding Z.J., Shimizu R. // Surf. Sci. 1988. V. 197. P. 539.
- [5] Палов А.П. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. С. 71.
- [6] Kawata J., Ohya K. // J. Phys. Soc. Jpn. 1994. V. 63. P. 795.
- [7] Hunter K.L., Snook I.K., Wagenfeld H.K., // J. Phys. D. 1994. V. 27. P. 1769.
- [8] Farhany H., Narchan E., Blott B.H. // J. Phys. D. 1994. V. 27. P. 2266.
- [9] Бабинов В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. Наука, 1988.
- [10] Smrcka L. // Czech. J. Phys. 1970. V. 132. P. 291.

- [11] *Toigo F., Woodruff T.O.* // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. P. 4312.
- [12] *Feibelman P.J.* // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. P. 762.
- [13] *Бронштейн И.М., Фрайман Б.С.* Вторичная электронная эмиссия. Наука, 1969.
- [14] *Thomas S., Pattinson E.B.* // J. Phys. D. 1970. V. 93. P. 349.

Поступило в Редакцию
3 июля 1996 г.
