

01;11

©1994 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ВЫХОДА ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЙ НА ОСНОВЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

*Л.А.Бакалейников, С.Г.Конников, К.Ю.Погребницкий, Д.Ж.Сайфидинов,
Э.А.Тропп, Ю.Н.Юрьев*

Введение

Определение вероятности выхода электронов, рожденных в результате внешнего воздействия на образец, является ключевой проблемой для ряда неразрушающих методов анализа материалов, таких как метод рентгеновских стоячих волн [1], SEXAFS-спектроскопия [2], метод профилирования состава по глубине QCDP [3]. Теоретический расчет вероятности выхода электрона представляет собой весьма сложную задачу, в связи с чем в литературе часто используются полуэмпирические выражения, полученные на основе анализа экспериментов по прострелу тонких пленок [4,5], или выражения, найденные путем аппроксимации результатов моделирования процессов транспорта электронов по методу Монте-Карло [6,7]. Зависимость вероятности выхода от глубины в этих выражениях носит линейный, квадратичный либо экспоненциальный характер. Экспериментальное определение функции выхода для образцов кремния и германия, облучаемых характеристическим рентгеновским излучением CuK_{α} , было выполнено в работе [1]. Приведенные в [1] экспериментальные результаты значительно отличаются от функции выхода, рассчитанной по линейной и экспоненциальной моделям. Квадратичная зависимость, найденная в [6,7], лучше согласуется с экспериментальными данными, однако, как отмечено в [1], измеренная длина выхода электронов оказывается меньше расчетной. Таким образом, существующие формулы для вероятности выхода электрона не обеспечивают удовлетворительной аппроксимации экспериментальных данных во всем диапазоне энергий генерированных электронов и атомных номеров образцов и, следовательно, нуждаются в дополнительном обосновании и определении областей их пригодности.

Целью настоящей работы является вычисление вероятности выхода электронов средних энергий на основе использования кинетического уравнения.

Теория

Кинетическое уравнение, описывающее распространение электронов, рожденных на глубине z_0 изотропно по углам с энергией E_0 в плоской геометрии, имеет вид

$$\cos \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial z} = R_{\text{col}} \Phi + \frac{1}{4\pi} \cdot \delta(z - z_0) \cdot \delta(E - E_0). \quad (1)$$

Здесь $\Phi(z, \Theta, E)$ — дифференциальная плотность потока электронов с энергией E на глубине z , распространяющихся под углом Θ к оси z ; $R_{\text{col}} \Phi$ — интеграл столкновений, описывающий взаимодействие электронов с веществом. Второе слагаемое в правой части (1) определяет наличие изотропного источника электронов единичной интенсивности с энергией E_0 на глубине z_0 . Уравнение (1) должно быть дополнено граничными условиями

$$\Phi \Big|_{\substack{z=0 \\ \cos \Theta > 0}} = 0 \quad \Phi \Big|_{z \rightarrow \infty} \Rightarrow 0, \quad (2)$$

означающими, что поток электронов, падающих на образец извне, равен нулю и генерация электронов на бесконечности отсутствует. Вероятность выхода электрона из эмиттера при этом представляет собой полный поток электронов $v(z)$, проходящих через $z = 0$, т.е.

$$q(z_0) = v(0) = \int_0^{E_0} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \Theta \Phi(0, \Theta, E) \sin \Theta d\Theta d\Phi dE. \quad (3)$$

Интеграл столкновений $R_{\text{col}} \Phi$, стоящий в правой части (1), описывает изменение направления движения и энергии электронов в результате взаимодействия с веществом эмиттера. Для электронов с энергиями порядка нескольких кэВ в процессах взаимодействия с веществом главную роль играет рассеяние на атомах, причем перераспределение по углам определяется в основном упругим рассеянием, при котором атом остается в невозбужденном состоянии, а изменение энергии в акте рассеяния связано с неупругими процессами. Поэтому интеграл столкновений может быть приближенно разбит на две части

$$R_{\text{col}} \Phi \approx R_{el} \Phi + R_{in} \Phi, \quad (4)$$

одна из которых ($R_{el} \Phi$) описывает перераспределение электронов по углам, а другая ($R_{in} \Phi$) — только по энергиям. Такое представление тем точнее, чем больше средний атомный номер эмиттера. Для электронов с энергиями E_0 порядка нескольких кэВ характерная длина изотропизации электронов $\lambda(E_0)$ оказывается существенно меньше, чем полный пробег электрона $S(E_0)$ в эмиттере, причем отношение

этих длин уменьшается с ростом среднего атомного номера. Таким образом, изменение направления движения электронов происходит на длинах, малых по сравнению с полным пробегом, и движение электронов к поверхности представляет собой диффузию, сопровождающуюся потерей энергии [8].

Вычислим вероятность выхода, учитывая указанные особенности кинетики быстрых электронов. Перейдем в кинетическом уравнении (1) к безразмерным переменным, выбирая в качестве масштаба глубин величину $\sqrt{\lambda(E_0)S(E_0)}$. Уравнение (1) примет вид

$$\varepsilon \cos \Theta \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \lambda(E_0) \cdot R_{el} \Phi + \varepsilon^2 \cdot S(E_0) R_{in} \Phi + \varepsilon^2 \delta(E-1) \delta(z-z_0). \quad (5)$$

Здесь $\varepsilon = \sqrt{\lambda(E_0)/S(E_0)}$ — малый параметр, энергия E измеряется в единицах E_0 . Упругая часть интеграла столкновений имеет вид

$$R_{el} \Phi = \int \sum_{4\pi} N_j \frac{d\sigma_{el}^j(E; \Omega', \Omega)}{d\Omega} \Phi(z, \Omega', E) d\Omega' - \\ - \Phi(z, \Omega, E) \cdot \int \sum_{4\pi} N_j \frac{d\sigma_{el}^j(E; \Omega, \Omega')}{d\Omega} d\Omega', \quad (6)$$

где $d\sigma_{el}^j(E, \Omega, \Omega')/d\Omega$ — дифференциальное сечение упругого рассеяния электрона на атоме j -го сорта, N_j — концентрация атомов j -го сорта.

Суммирование в (6) проводится по всем сортам атомов, содержащихся в эмиттере. Поскольку взаимодействие быстрых электронов с атомами можно считать изотропным, то дифференциальное сечение упругого рассеяния зависит от $\Omega' \cdot \Omega$, а не от Ω' и Ω по отдельности. Вследствие этого собственные функции оператора $\lambda(E)R_{el}\Phi$ представляют собой сферические гармоники $Y_{i,j}(\Omega)$. Обозначим соответствующие функциям $Y_{i,j}(\Omega)$ собственные числа через $\nu_i(E)$. Каждое из собственных чисел $\nu_i(E)$ имеет кратность $2i+1$. Кроме того, $\nu_0(E) = 0$.

Решение уравнения (5) будем искать в виде ряда

$$\Phi = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k(z, \Theta, E) \cdot \varepsilon^k. \quad (7)$$

Подстановка (7) в (5) приводит к цепочке уравнений относительно Φ_k . Решением первого уравнения цепочки является функция, не зависящая от Ω ,

$$\Phi_0(z, \Theta, E) = U_0(z, E). \quad (8)$$

Правая часть второго уравнения пропорциональна функции $Y_{1,0}(\Omega)$, вследствие чего оно разрешимо всегда. Решение третьего уравнения цепочки существует не всегда. Условие его разрешимости заключается в ортогональности правой части уравнения собственной функции $Y_0(\Omega)$ и имеет вид

$$\frac{1}{3\nu_1(E)} \frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - S(E_0) R_{in} U_0 - \delta(z-z_0) \delta(E-1) = 0. \quad (9)$$

Это уравнение определяет функцию U_0 . Использование приближения непрерывного замедления для аппроксимации неупругой части интеграла столкновений позволяет записать (9) в виде

$$\frac{1}{3\nu_1(E)} \frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial E} (\gamma(E)U_0) - \delta(z - z_0)\delta(E - 1) = 0, \quad (10)$$

где $\gamma(E) = \beta(EE_0)S(E_0)$, $\beta(E)$ — средние потери энергии на единице длины.

Отсутствие источников электронов на границе $z = 0$ и на бесконечности приводит к граничным условиям

$$U_0 \Big|_{z=0} = 0, \quad U_0 \Big|_{z \rightarrow \infty} \Rightarrow 0. \quad (11)$$

Поскольку все электроны имеют энергию $E \leq 1$ и поступление электронов с энергией $E = 1$ в эмиттер учтено в (10) с помощью источника, то

$$U_0 \Big|_{E=1} = 0. \quad (12)$$

Замена $W_0(z, E) = \gamma(E)U_0(z, E)$ и переход от E к τ по формуле

$$\tau = \int_1^E \frac{dE}{3\nu_1(E)\gamma(E)} \quad (13)$$

приводит уравнение (10) к канонической форме с решением

$$W_0(z, \tau) = \frac{1}{8\pi^{3/2}\tau^{1/2}} \left(\exp(-(z - z_0)^2/(4\tau)) - \exp(-(z + z_0)^2/(4\tau)) \right). \quad (14)$$

Возвращаясь к функции $U_0(z, E)$ и учитывая, что решение второго уравнения цепочки имеет вид

$$\Phi_1(z, \Theta, E) = \cos \Theta \frac{1}{\nu_1(E)} \frac{\partial U_0}{\partial z}, \quad (15)$$

получим приближенное выражение для дифференциальной плотности потока

$$\Phi(z, \Theta, E) \approx \frac{W_0(z, \tau(E))}{\gamma(E)} + \varepsilon \frac{\cos \Theta}{\nu_1(E)\gamma(E)} \frac{\partial W_0}{\partial z}. \quad (16)$$

Подстановка (16) в выражение для полного потока (3) позволяет найти вероятность выхода электрона

$$q(z_0) = 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z_0}{L} \right), \quad L = 2\sqrt{\lambda(E_0)S(E_0)\tau^*}, \quad (17)$$

где

$$\tau^* = \int_1^0 \frac{dE}{3\nu_1(E)\gamma(E)}. \quad (18)$$

Результаты и их обсуждение

Полученное выражение для вероятности выхода электронов средних энергий было использовано для расчета функций выхода $K(t)$, измеренных в работе [1]. Экспериментальное определение $K(t)$ основано на регистрации угловых зависимостей фотоэмиссии при брэгговской дифракции рентгеновских лучей на кристаллах германия и кремния с приповерхностными аморфными слоями различной толщины. Различие угловых зависимостей фотоэмиссии из слоя и подложки позволяет разделить их вклад в полный квантовый выход. Предполагая, что вероятность выхода электронов $q(z)$ одинакова для кристалла и аморфной пленки, т.е. пренебрегая ориентационными эффектами в процессе транспорта электронов и считая, что длина выхода электронов много меньше характерной глубины рентгеновского поглощения, в [1] было найдено отношение $K(t)$ количества электронов, вышедших из пленки толщиной t , к полному количеству вышедших электронов

$$K(t) = \int_0^t q(z) dz / \int_0^{\infty} q(z) dz. \quad (19)$$

Измерение $K(t)$ проводилось для образцов, облучаемых линией CuK_α (энергия рентгеновских фотонов 8.05 кэВ). Характеристики электронов, возникающих в результате фотоионизации, представлены в табл. 1, 2.

Учитывая, что электроны разных групп характеризуются разными вероятностями выхода, выражение (19) можно переписать в виде

$$K(t) = \sum P_i \int_0^t q_i(z) dz / \sum P_i \int_0^{\infty} q_i(z) dz. \quad (20)$$

Таблица 1. Характеристики основных групп электронов, образующихся при взаимодействии CuK_α излучения с образцом германия

Электроны	Энергия, кэВ	Вероятность рождения	L , см	L^l , см	$S(E_0)$, см
e_L	6.83	0.88	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$3.76 \cdot 10^{-5}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$
e_M	7.9	0.12	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$	$5.8 \cdot 10^{-5}$
e_{LMM}	1.16	0.86	$8.4 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$

Таблица 2. Характеристики основных групп электронов, образующихся при взаимодействии CuK_α излучения с образцом германия

Электроны	Энергия, кэВ	Вероятность рождения	L , см	L^l , см	$S(E_0)$, см
e_K	6.2	0.92	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$6.65 \cdot 10^{-5}$	$5.7 \cdot 10^{-5}$
e_L	7.9	0.08	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$9.33 \cdot 10^{-5}$	$8.6 \cdot 10^{-5}$
e_{KLL}	1.6	0.88	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$9.9 \cdot 10^{-6}$	$5.9 \cdot 10^{-6}$

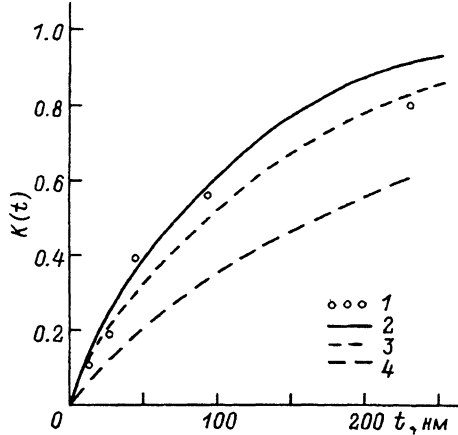
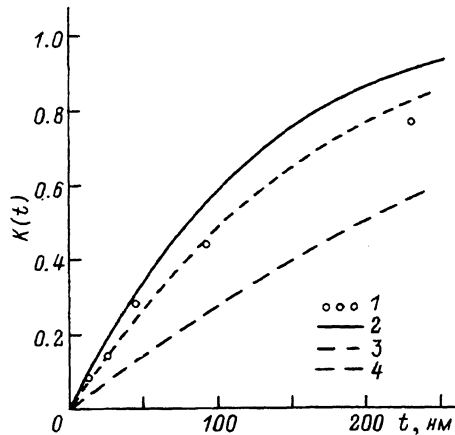


Рис. 1. Зависимость доли $K(t)$ электронов, вышедших из слоя, от толщины слоя t для кремния, облучаемого $\text{CuK}\alpha$ -линией при запирающем напряжении 1.9 кВ (вклад в квантовый выход вносят лишь электроны 1-й и 2-й групп).

Рис. 2. То же, что и на рис. 1, при запирающем напряжении 50 В (вклад в квантовый выход вносят электроны 1, 2 и 3-й групп).

1 — экспериментальные результаты [1], 2 — результаты расчета по формуле (26) с функцией выхода (23), 3 — результаты расчета по формуле (26) с функцией выхода (23) и увеличенной в 1.3 раз длиной выхода, 4 — результаты расчета по формуле (26) с функцией выхода (27).

Суммирование здесь проводится по всем группам электронов, дающим вклад в квантовый выход. Эксперименты в [1] проводились при различных напряжениях на сетке, расположенной между образцом и счетчиком, что позволяет выделить вклад в квантовый выход отдельных групп электронов. Для Si зависимость $K(t)$ была определена при запирающих напряжениях $U_c = 1.9$ кВ, 50 В, а для Ge — при $U_c = 1.3$ кВ, 50 В. При этом вклад в квантовый выход для $U_c = 1.9(1.3)$ кВ вносят лишь электроны 1-й и 2-й групп (табл. 1, 2), а для $U_c = 50$ В — электроны 1, 2 и 3-й групп.¹ Результаты расчета $K(t)$ по формуле (20) с использованием (17) приведены на рис. 1–4. На тех же рисунках показаны зависимости $K(t)$, рассчитанные при помощи широко используемой эмпирической формулы для вероятности выхода [4]

$$q(z) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{z}{L} \right), \quad L^l = \frac{6 \cdot 10^{-6} \cdot A}{\rho Z} E^{1.4}. \quad (21)$$

Зависимости $K(t)$, рассчитанные с вероятностью выхода (17), демонстрируют неплохое согласие с экспериментальными данными.

Большее расхождение экспериментальных и теоретических результатов для Si связано, по-видимому, с малостью его атомного номера.

¹ Доля электронов, обладающих начальными энергиями порядка 100 эВ, в регистрируемой фотоэмиссии будет, по-видимому, небольшой, так как энергетический спектр выходящих электронов слабо меняется в диапазоне 50–200 эВ [9].

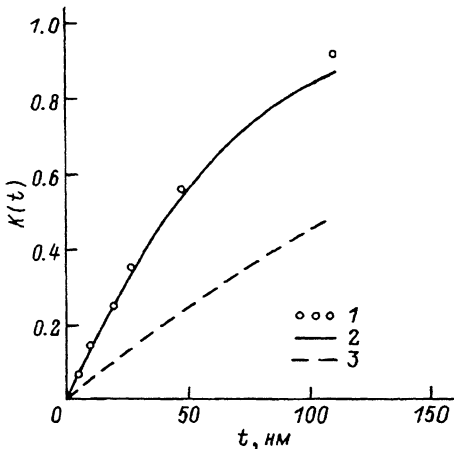


Рис. 3. Зависимость доли $K(t)$ электронов, вышедших из слоя, от толщины слоя t для германия, облучаемого $\text{CuK}\alpha$ -линией, при запирающем напряжении 1.3 кВ (вклад в квантовый выход вносят лишь электроны 1-й и 2-й групп).

1 — экспериментальные результаты [1], 2 — результаты расчета по формуле (26) с функцией выхода (23), 3 — результаты расчета по формуле (26) с функцией выхода (27).

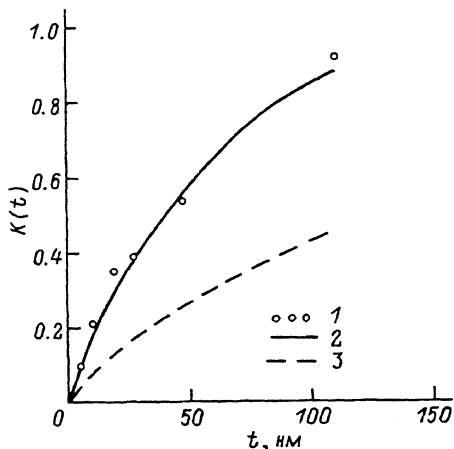


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, запирающем напряжении 50 В (вклад в квантовый выход вносят электроны 1, 2 и 3-й групп).

Действительно, процедура разложения решения кинетического уравнения по параметру ε , использованная для получения (17), является корректной лишь при достаточно малых значениях ε . В то же время отношение λ/S растет с убыванием атомного номера образца, так что, например, для Si при энергии электронов $E_0 = 7$ кэВ малый параметр $\varepsilon = \sqrt{\lambda(E_0)/S(E_0)}$ имеет величину порядка 0.7. Отметим, что расхождение рассчитанных и измеренных зависимостей $K(t)$ для Si может быть улучшено при введении небольшого корректирующего фактора, увеличивающего длину выхода, найденную по (17), в 1.3 раз (рис. 2).

Кривые $K(t)$, рассчитанные с использованием (21), сильно отличаются от экспериментальных результатов. Это связано прежде всего с величиной характерных длин выхода электронов. Характерные длины выхода L_i , L_i^1 для электронов различных групп, рассчитанные по (17), (18) и по (21), представлены в табл. 1, 2. Как видно, значения L_i оказываются существенно меньшими, чем соответствующие значения величин L_i^1 . Это связано с тем, что значения L_i^1 определялись эмпирически из экспериментов по прострелу тонких пленок и не учитывают перераспределения электронов по углу в процессе транспорта. В то же время именно угловое перераспределение оказывается определяющим в процессе переноса электронов с энергиями порядка нескольких кэВ, что приводит к диффузионному характеру распространения электронов от точки генерации до поверхности.

Таким образом, вероятность выхода электронов средних энергий из полубесконечного эмиттера, рассчитанная на основе приближенного

решения кинетического уравнения, правильно учитывает особенности транспорта электронов и в отличие от предложенных ранее формул обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными, что позволяет использовать ее для определения полного квантового выхода в методах диагностики материалов, использующих явление рентгеновской фотоэмиссии.

Настоящая работа была выполнена при поддержке фонда "American Physical Society".

Список литературы

- [1] *Kruglov M.V., Solomin I.K., Lunev A.V.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1986. Vol. 133. P. 47-55.
- [2] *Boon T.* Теор. EXAFS: Basic Principals and Data Analysis. Vol. S-V. Berlin, 1986. 295 p.
- [3] *Backaleinickov L.A., Konnikov S.G., Pogrebitsky K.Yu.* et al. // Advances in X-ray Analysis. Vol. 35. P. 1243-1246.
- [4] *Шемелев В.Н., Тагиров И.Р., Буабеллу А., Созонтов Е.А.* // Поверхность. 1983. № 11. С. 56-62.
- [5] *Шемелев В.Н.* // Вопросы электроники твердого тела. 1982. № 8. С. 180-194.
- [6] *Liljequist D.* Electron Penetration in Solids and its Application to Mossbauer Spectroscopy. USIP Report. Stockholm, 1979. 34 p.
- [7] *Liljequist D., Ekdal T., Baverstam U.* // Nuclear Instr. and Methods. 1978. Vol. 155. P. 529-537.
- [8] *Бакалейников Л.А., Тронн Э.А.* // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 1. С. 16-26.
- [9] *Bedzik M.J., Kovalchuk M.V., Materlik G.* // Metallofiz. 1984. Vol. 6. P. 101-110.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Послупило в Редакцию
9 апреля 1993 г.

