

# 固体中能量电子的输运

## ——计算机仿真及其在材料分析和表征中的应用

Transport of Energetic Electrons in Solids  
Computer Simulation with Applications to  
Materials Analysis and Characterization

[意] 毛里奇奥·戴普瑞 (Maurizio Dapor) 著  
张娜 崔万照 王芳 译

# 固体中能量电子的输运

## ——计算机仿真及其在材料 分析和表征中的应用

**Transport of Energetic Electrons in Solids**  
**Computer Simulation with Applications to**  
**Materials Analysis and Characterization**

[意] 毛里奇奥·戴普瑞(Maurizio Dapor) 著  
张娜 崔万照 王芳 译



国防工业出版社

·北京·

# 著作权合同登记 图字:军-2015-277 号

## 图书在版编目 (CIP) 数据

固体中能量电子的输运:计算机仿真及其在材料分析和表征中的应用/(意)毛里奇奥·戴普瑞(Maurizio Dapor)著;张娜等译. —北京:国防工业出版社,2017. 1

书名原文:Transport of Energetic Electrons in Solids: Computer Simulation with Applications to Materials Analysis and Characterization

ISBN 978-7-118-10948-1

I. ①固… II. ①毛… ②张… III. ①固体—电子运动—研究 IV. ①TN101

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 275883 号

Translation from English language edition:

*Transport of Energetic Electrons in Solids*

by Maurizio Dapor

Copyright © 2014 Springer International Publishing

Springer International Publishing is a part of Springer Science + Business Media

All Rights Reserved

本书简体中文版由 Springer 出版社授予国防工业出版社独家出版发行。

版权所有,侵权必究。

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

三河市众誉天成印务有限公司印刷

新华书店经售

\*

开本 710 × 1000 1/16 印张 8 1/4 字数 152 千字

2017 年 1 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2000 册 定价 68.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店: (010)88540777

发行邮购: (010)88540776

发行传真: (010)88540755

发行业务: (010)88540717

## PREFACE | 译者序

电子束与材料的相互作用是物理电子学科中非常重要的研究内容,其所产生的信息是表征材料化学和成分特性的有效手段,同时所涵盖的二次电子发射现象在加速器、高功率微波源、空间大功率微波器件、卫星表面充放电等领域得到了广泛关注。

蒙特卡罗方法是研究电子与固体相互作用的有效方法,本书介绍了电子与材料相互作用的物理现象,清晰地阐述了相互作用过程的各种散射机制及散射截面,给出了背散射电子和二次电子的发射系数、二次电子能谱等关键参数的具体的模拟仿真,是适合物理电子学领域相关研究人员使用的理想著作。

全书共分为13章,其中第1章、第6章、第8~12章由张娜翻译,第2~5章和第7章由王芳翻译,第13章由崔万照翻译,张娜、王芳对全书进行了审校,张娜对全书进行了统稿。

本书能够出版,感谢中国空间技术研究院西安分院的大力支持。译者在繁忙的工作、学业之余,能够译成本书,特别感谢空间微波技术重点实验室营造的氛围和工作环境。感谢西安交通大学曹猛老师在翻译中给予的专业指导。同时也感谢空间微波技术重点实验室的同事们,尤其是白春江、封国宝、王瑞、胡天存、李韵、王新波、谢贵柏等人,感谢他们参与部分书稿的审校与讨论。本书还得到了国家自然科学基金项目(U1537211)和空间微波技术重点实验室基金(9140C530101130C53013、9140C530101140C53231)的资助。

由于译者水平有限,书中难免有疏漏与不妥之处,恳请广大读者批评指正。

译者

2016年8月

## FOREWORD | 前言

在现代物理中,我们感兴趣的是多维自由度的系统。例如固体中原子的数目、原子中电子的数目或者与固体中许多原子和电子相互作用的束流中的电子的数目。

在许多情况下,这些系统都可以通过计算高维的定积分来描述。例如,温度  $T$  下多原子气体的经典配分函数的计算。蒙特卡罗方法通过横坐标上的随机抽样来估算被积函数,为我们提供了一种计算高维定积分的精确方法。

在研究粒子束与固体靶材相互作用时,蒙特卡罗方法还可以用来计算许多重要的物理量。基于随机采样方法对相关物理过程进行模拟,可以解决许多粒子输运问题。考虑单次碰撞效应的粒子以伪随机路径行进,则可精确地分析扩散过程。

本书致力于研究电子束与固体靶材的相互作用。作为本领域的研究者,相信本书对于学习数千伏的电子在固体中的输运过程是非常有帮助的。对于初学者而言,从大量的文献中理出头绪并对其进行详尽研究是一件不容易的事情。

蒙特卡罗模拟是研究电子与固体相互作用的相关物理量的最有力的理论方法。它是一种理想的实验。虽然模拟本身并不研究相互作用的基本原理,但是了解这些原理,对于实现好的模拟过程,尤其是能量损失和角度偏转现象,则很有必要。

相对于该领域的许多其它论著(包括 2003 年作者在 Springer - Verlag 出版的《Electron - Beam Interactions with Solids》一书),本书在以下两方面进行了修正:

(1) 本书系统地缩减了较难理论部分的数学内容。这部分内容的核心概念是散射截面的计算,为简单起见,删除了许多数学上的细节。对能量损失和角度偏转的理论部分进行了简化:给出了计算阻止本领、微分非弹性平均自由程的倒数及微分弹性散射截面的简单方案。这同时避免了描述深奥的量子理论。相关的数学内容和细节可以查找附录、作者之前的专著及其他现代物理和量子力学

的书籍。

(2) 为了让初学者在固体中电子的输运方面打下坚实的基础,本书在推导和使用简单的理论输运模型时增加了很多细节描述。这只有通过逐步的解析公式推导才能获得。

评估蒙特卡罗程序质量的基本方法是将模拟结果与现有的实验数据进行比较。本书后半部分给出了数千伏电子在固体中输运的蒙特卡罗方法的应用。本书对计算的模拟结果与实验数据进行了比较,以期为读者提供更全面的视角。

Maurizio Dapor

2013 年 10 月于波沃

## 致 谢

非常感谢我的妻子、我们可爱的孩子及拥有无限耐心的父母,感谢他们慷慨的奉献及长期以来的支持。

此外,我还想感谢很多人,我的朋友、同事,感谢他们对于本书给出的成果所付出的热情,提供的宝贵建议、想法和技能。

我想向 Diego Bisero, Lucia Calliari, Giovanni Garberoglio 和 Simone Taioli 表示衷心的感谢。感谢他们给予诚挚的友谊、鼓励和优秀的学术建议。

同时,我衷心地感谢以下所有的研究者,在他们的帮助下本书才得以完成: Nicola Bazzanella, Eric Bosch, Mauro Ciappa, Michele Crivellari, Sergey Fanchenko, Wolfgang Fichtner, Massimiliano Filippi, Stefano Gialanella, Stephan Holzer, Emre Ilgüsatiroglu, Beverley J. Inkson, Mark A. E. Jepson, Alexander Koschik, Antonio Miotello, Francesco Pederiva, Cornelia Rodenburg, John M. Rodenburg, Manoranjan Sarkar, Paolo Scardi, Giorgina Scarduelli, Siegfried Schmauder, Stefano Simonucci, Laura Toniutti, Chia - Kuang (Frank) Tsung 和 Wolfram Weise.

感谢特伦托多学科交叉计算科学实验室(LISC)的所有同事们。感谢他们富有成效的讨论。感谢 LISC 的激励氛围为本书提供了理想的工作环境。

我衷心地感谢 Maria Del Huerto Flammia 在校稿上提供的专业帮助及对本书文字的改进。

我还想感谢谢菲尔德大学的工程材料系、苏黎世的瑞士联邦理工学院(ETH)的集成系统实验室提供的热情帮助。本书得到了国家核物理研究所(INFN)在布鲁诺·凯斯勒基金(FBK)“高性能计算”合同的支持。

## CONTENTS | 目录

|                                    |    |
|------------------------------------|----|
| 第1章 电子在固体中的运输 .....                | 1  |
| 1.1 电子束与固体的相互作用 .....              | 1  |
| 1.2 电子能量损失峰 .....                  | 3  |
| 1.3 俄歇电子峰 .....                    | 4  |
| 1.4 二次电子峰 .....                    | 4  |
| 1.5 材料的表征 .....                    | 5  |
| 1.6 小结 .....                       | 5  |
| 参考文献 .....                         | 6  |
| 第2章 散射截面:基本原理 .....                | 8  |
| 2.1 散射截面和散射概率 .....                | 9  |
| 2.2 阻止本领和非弹性散射平均自由程 .....          | 10 |
| 2.3 射程 .....                       | 11 |
| 2.4 能量歧离 .....                     | 11 |
| 2.5 小结 .....                       | 12 |
| 参考文献 .....                         | 12 |
| 第3章 散射机制 .....                     | 13 |
| 3.1 弹性散射 .....                     | 13 |
| 3.1.1 Mott 散射截面与屏蔽卢瑟福散射截面 .....    | 14 |
| 3.2 准弹性散射 .....                    | 19 |
| 3.2.1 电子-声子相互作用 .....              | 19 |
| 3.3 非弹性散射 .....                    | 19 |
| 3.3.1 阻止本领: Bethe - Bloch 公式 ..... | 20 |
| 3.3.2 阻止本领: 半经验公式 .....            | 20 |
| 3.3.3 介电理论 .....                   | 21 |

|            |                              |           |
|------------|------------------------------|-----------|
| 3.3.4      | Drude 函数之和 .....             | 26        |
| 3.3.5      | 极化子效应 .....                  | 29        |
| 3.4        | 非弹性散射平均自由程 .....             | 30        |
| 3.5        | 界面现象 .....                   | 31        |
| 3.6        | 小结 .....                     | 34        |
|            | 参考文献 .....                   | 34        |
| <b>第4章</b> | <b>随机数 .....</b>             | <b>36</b> |
| 4.1        | 伪随机数的产生 .....                | 36        |
| 4.2        | 伪随机数发生器的测试 .....             | 37        |
| 4.3        | 基于给定概率密度的伪随机数分布 .....        | 37        |
| 4.4        | 区间 $[a, b]$ 内均匀分布的伪随机数 ..... | 37        |
| 4.5        | 基于泊松概率密度的伪随机数分布 .....        | 38        |
| 4.6        | 基于高斯概率密度的伪随机数分布 .....        | 38        |
| 4.7        | 小结 .....                     | 39        |
|            | 参考文献 .....                   | 39        |
| <b>第5章</b> | <b>蒙特卡罗策略 .....</b>          | <b>40</b> |
| 5.1        | 连续慢化近似 .....                 | 40        |
| 5.1.1      | 步长 .....                     | 41        |
| 5.1.2      | 沉积层与衬底的界面 .....              | 41        |
| 5.1.3      | 散射极角 .....                   | 41        |
| 5.1.4      | 上一次偏转后电子的方向 .....            | 42        |
| 5.1.5      | 能量损失 .....                   | 42        |
| 5.1.6      | 轨迹的结束和轨迹的数目 .....            | 43        |
| 5.2        | 能量歧离策略 .....                 | 43        |
| 5.2.1      | 步长 .....                     | 43        |
| 5.2.2      | 弹性和非弹性散射 .....               | 44        |
| 5.2.3      | 电子-电子散射: 散射角 .....           | 45        |
| 5.2.4      | 电子-声子散射: 散射角 .....           | 46        |
| 5.2.5      | 上一次偏转后电子的方向 .....            | 46        |
| 5.2.6      | 透射系数 .....                   | 46        |
| 5.2.7      | 与表面距离相关的非弹性散射 .....          | 48        |
| 5.2.8      | 轨迹的结束和轨迹的数目 .....            | 50        |

|                                             |           |
|---------------------------------------------|-----------|
| 5.3 小结                                      | 50        |
| 参考文献                                        | 50        |
| <b>第6章 背散射系数</b>                            | <b>52</b> |
| 6.1 固体靶材的背散射电子                              | 52        |
| 6.1.1 采用介电理论(Ashley 阻止本领)计算碳和铝的背散射系数        | 53        |
| 6.1.2 采用介电理论(Tanuma 等阻止本领)计算硅、铜和金的背散射系数     | 53        |
| 6.2 半无限衬底上单沉积层的背散射电子                        | 55        |
| 6.2.1 碳沉积层(Ashley 阻止本领)                     | 55        |
| 6.2.2 金沉积层(Kanaya 和 Okayama 阻止本领)           | 56        |
| 6.3 半无限衬底上双沉积层的背散射电子                        | 58        |
| 6.4 电子与正电子背散射系数和深度分布的比较                     | 62        |
| 6.5 小结                                      | 63        |
| 参考文献                                        | 64        |
| <b>第7章 二次电子发射系数</b>                         | <b>65</b> |
| 7.1 二次电子发射                                  | 65        |
| 7.2 研究二次电子发射的蒙特卡罗方法                         | 66        |
| 7.3 研究二次电子的特定蒙特卡罗方法                         | 66        |
| 7.3.1 连续慢化近似(CSDA)                          | 66        |
| 7.3.2 能量歧离(ES)                              | 67        |
| 7.4 二次电子发射系数:PMMA 和 $\text{Al}_2\text{O}_3$ | 68        |
| 7.4.1 二次电子发射系数和能量的函数关系                      | 68        |
| 7.4.2 ES 策略与实验的比较                           | 68        |
| 7.4.3 CSDA 与 ES 策略的比较                       | 69        |
| 7.4.4 CSDA 策略与实验的比较                         | 70        |
| 7.4.5 CPU 时间                                | 72        |
| 7.5 小结                                      | 73        |
| 参考文献                                        | 73        |
| <b>第8章 二次电子能量分布</b>                         | <b>75</b> |
| 8.1 能谱的蒙特卡罗模拟                               | 75        |

|             |                          |           |
|-------------|--------------------------|-----------|
| 8.2         | 等离激元损失和电子能量损失谱           | 77        |
| 8.2.1       | 石墨的等离激元损失                | 77        |
| 8.2.2       | SiO <sub>2</sub> 的等离激元损失 | 78        |
| 8.3         | 俄歇电子的能量损失                | 79        |
| 8.4         | 电子能谱的弹性峰                 | 80        |
| 8.5         | 二次电子能谱                   | 81        |
| 8.5.1       | 二次电子的初始极角及方位角            | 81        |
| 8.5.2       | 理论和实验数据的比较               | 82        |
| 8.6         | 小结                       | 85        |
|             | 参考文献                     | 85        |
| <b>第9章</b>  | <b>应用</b>                | <b>87</b> |
| 9.1         | 临界尺度 SEM 的线宽测量           | 87        |
| 9.1.1       | CD SEM 中的纳米测量和线宽测量       | 87        |
| 9.1.2       | 横向和深度分布                  | 88        |
| 9.1.3       | 以入射角为函数的二次电子发射系数         | 88        |
| 9.1.4       | 硅平台的线扫描                  | 89        |
| 9.1.5       | 硅衬底上 PMMA 线的线扫描          | 90        |
| 9.2         | 在能量选择扫描电子显微镜中的应用         | 90        |
| 9.2.1       | 掺杂衬度                     | 90        |
| 9.2.2       | 能量选择扫描电子显微镜              | 91        |
| 9.3         | 小结                       | 92        |
|             | 参考文献                     | 92        |
| <b>第10章</b> | <b>附录 A: Mott 理论</b>     | <b>94</b> |
| 10.1        | 相对论分波展开法                 | 94        |
| 10.2        | Mott 截面的解析近似             | 96        |
| 10.3        | 原子势                      | 96        |
| 10.4        | 电子交换                     | 97        |
| 10.5        | 固态效应                     | 97        |
| 10.6        | 正电子微分弹性散射截面              | 97        |
| 10.7        | 小结                       | 98        |
|             | 参考文献                     | 98        |

|        |                                 |     |
|--------|---------------------------------|-----|
| 第 11 章 | 附录 B:Fröhlich 理论 .....          | 99  |
| 11.1   | 晶格场中的电子:哈密顿相互作用 .....           | 99  |
| 11.2   | 电子-声子散射截面 .....                 | 101 |
| 11.3   | 小结 .....                        | 106 |
|        | 参考文献 .....                      | 106 |
| 第 12 章 | 附录 C:Ritchie 理论 .....           | 107 |
| 12.1   | 能量损失和介电函数 .....                 | 107 |
| 12.2   | 均匀各向同性固体 .....                  | 109 |
| 12.3   | 小结 .....                        | 110 |
|        | 参考文献 .....                      | 111 |
| 第 13 章 | 附录 D:Chen、Kwei 和 Li 等人的理论 ..... | 112 |
| 13.1   | 出射和入射电子 .....                   | 112 |
| 13.2   | 非弹性散射的概率 .....                  | 112 |
| 13.3   | 小结 .....                        | 114 |
|        | 参考文献 .....                      | 114 |
| 索引     | .....                           | 115 |

---

## 第1章

# 电子在固体中的输运

---

在粒子束与固体相互作用的研究中,蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 方法可用于评估许多重要的物理量。在很多分析技术中,背散射电子和二次电子的研究尤其受到关注。深入了解背散射电子和二次电子发射之前的过程有助于更好地理解表面物理。

---

### 1.1 电子束与固体的相互作用

电子在固体内的行进过程中,与固体中原子的每一次碰撞都会引起能量的损失和方向的改变。由于电子和原子核质量相差很大,因此原子核使电子发生偏转,而电子的动能转移的非常少。这一过程由微分弹性散射截面(可由所谓的相对论分波展开法相当于 Mott 截面<sup>[1]</sup>)计算描述。对于高能电子和低原子序数的靶原子,其满足一阶玻恩近似条件,此时 Mott 截面可以采用屏蔽卢瑟福(Rutherford)公式近似。此外,靶原子中电子的激发和发射、等离激元的激发均会引起入射电子能量的损失。这些过程对于入射电子方向影响很小,因此称为非弹性事件。等离激元的激发可以通过微分非弹性平均自由程的倒数所满足的方程描述,由 Ritchie 的介电理论<sup>[2]</sup>计算。Fröhlich 理论<sup>[3]</sup>可用于描述绝缘体材料中电子-声子间的准弹性相互作用。相对于等离激元的能量损失来说,电子-声子相互作用引起的能量转移非常小,可以认为是准弹性散射。在绝缘材料中,电子的动能显著减小,因此需要考虑由极化子效应引起的捕获现象<sup>[4]</sup>。

当电子动能高于 10keV 时,采用卢瑟福微分弹性散射截面(弹性散射)和 Bethe - Bloch 阻止本领公式或半经验阻止本领<sup>①</sup>公式(非弹性散射),MC 模拟可

---

① 本书采用阻止本领代替阻止力,表明电子在固体中行进单位距离损失的能量。尽管采用文献中的阻止力的表达式具有单位一致性和更高的精度。如 Sigmund<sup>[6]</sup>所述,随着阻止本领的术语近一百年的使用,阻止力已经很少出现了。

以给出很好的结果;但是,当电子能量远小于  $5\text{keV}$  时,这也就是二次电子发射的条件,蒙特卡罗模拟就失效了<sup>[5]</sup>。这是由很多因素导致的,但最重要的是以下三个方面的因素:

(1) 卢瑟福公式是一阶玻恩近似的结果,它是一个高能近似。

(2) 同样,  $\text{Bethe} - \text{Bloch}$  公式也只有在能量非常高时才有效,特别是当电子能量  $E$  小于平均电离能  $I$  时,  $\text{Bethe} - \text{Bloch}$  阻止本领并不能给出正确的结果。随着  $E$  接近于  $I/1.166$ , 计算结果达到最大然后趋于 0。当  $E \leq I/1.166$  时,计算的阻止本领将为负值。使用半经验公式有时候可以修正这一问题。实际上,低能弹性散射过程的计算必须借助基于介电函数的数值方法,该介电函数是能量损失和动量转移的函数。

(3) 在 MC 代码中引入阻止本领,相当于使用所谓的连续慢化近似(Continuous-slowing-down approximation, CSDA)。这种描述能量损失的方法实际上完全忽略了电子在数次非弹性碰撞中的能量损失。有时候电子甚至会在单次碰撞中损失所有的能量。换句话说,任何描述电子实际轨迹的模型在描述电子能量损失时都不应该使用连续近似。只有当所涉及的问题并不关注能量损失机制的具体细节时,才能(此时本书也会)使用 CSDA。例如,在计算背散射系数时会使用 CSDA。在某些特殊情况,甚至在计算二次电子发射系数时也会使用 CSDA。相反,当描述出射电子(背散射电子和二次电子)能量分布时,计算中就不能使用能量的连续近似而必须包含能量歧离(energy straggling, ES)——电子在固体中行进时因每次能量损失的不同而引起的能量损失的统计涨落。

研究二次电子的散射过程需要精确地处理低能弹性散射和非弹性散射,并适当地考虑能量歧离。二次电子的整个级联过程都需要进行追踪,任何的截断或截止均会导致对二次电子发射系数估计过低。此外,如前所述,当电子能量变得很小时(低于  $10 \sim 20\text{eV}$ ),绝缘材料内的能量损失的主要机制并不局限于电子-电子间的相互作用,电子与其他粒子或准粒子间的非弹性作用也会影响电子的能量损失。特别是当电子能量非常低时,由于电子-极化子间相互作用(极化子效应)和电子-声子间相互作用引起的陷阱现象将成为能量损失的主要机制。对于电子-声子间相互作用,甚至需要考虑声子的湮灭和相应的电子能量增加。实际中通常忽略电子能量的增加,因为它们发生的概率非常小,任何情况下远小于声子产生的概率。

总的来说,由于与样品原子的相互作用,入射电子发生散射且能量损失,其方向和动能均发生变化。通常把碰撞事件分为三种不同的类型:弹性碰撞(与原子核散射)、准弹性碰撞(与声子散射)和非弹性碰撞(与原子中电子和极化子效应引起的陷阱散射)。

## 1.2 电子能量损失峰

电子能量损失谱探讨入射电子损失能量的基本过程,入射电子所损失的能量可以表征靶材的特性<sup>[2,7-22,24-27]</sup>。电子能谱代表了电子与靶材相互作用后,以能量为函数的出射电子数目。能谱可以表示为电子能量的函数或者电子能量损失的函数。在第二种情况中,能谱左边的第一个峰位于零能量损失处,即零能量损失峰,也就是众所周知的弹性峰。在弹性峰中,包含了在透射电子能量损失谱(TEELS)中所有的透射电子,或者在反射电子能量损失谱(REELS)中所有的背散射电子,这些过程均没有任何明显的能量损失,即弹性峰包括了没有任何能量损失的电子,也包括了与声子(由于能量转移非常小,因此不能采用传统的光谱计通过实验分辨)经过一次或多次准弹性碰撞的透射电子或背散射电子。在TEELS中,弹性峰包括了所有没有发生散射的电子,也就是说这些电子在靶材的行进过程中没有发生任何偏转和能量损失。

实际上,弹性峰的电子能量存在轻微的损失,这是由于反冲动能转移到了样品的原子中。弹性峰电子谱(EPES)是用于分析弹性峰线形的技术<sup>[28,29]</sup>。由于较轻的元素表现出了较大的能量偏移,通过测量碳弹性峰位置和氢弹性峰位置间的能量差,EPES可用于检测高分子材料和氢化碳基材料<sup>[30-37]</sup>中的氢,例如,入射电子能量为1000~2000eV时,弹性峰能量位置间的差为2~4eV。

从弹性峰到第一个30~40eV间,一般存在一个很宽范围的峰,包含了与原子外壳层电子非弹性相互作用的所有电子。通常,它包括了与等离激元发生非弹性相互作用(等离激元损失)而损失能量的电子,其对应于能带内和能带间跃迁的电子。如果样品足够厚(在TEELS中)或是体样品(在REELS中)的情况下,那么电子在从样品中逃逸出来之前,与等离激元经过多次非弹性碰撞的概率是不可忽略的。这种电子与等离激元的多重非弹性碰撞在能谱中表征为一系列等距峰(这些峰间的距离由等离激元能量给定)。这些多重非弹性散射峰的相对强度随着能量损失的增加而降低,这表明经过一次非弹性碰撞的概率远大于经过两次非弹性碰撞的概率,依此类推,经过两次非弹性碰撞的概率远大于经过三次非弹性碰撞的概率。当然,在TEELS中,可以测量到多重散射峰的数目也是样品厚度的函数。当膜厚远大于电子非弹性平均自由程时,在多重等离激元能量中可以清晰地看到多个散射峰,这些散射峰位于弹性峰和100~200eV附近的能量损失区域(能谱中100~200eV到弹性峰的区间)。另外,当膜厚远小于电子非弹性平均自由程时,在低于100~200eV的能量损失区间(在能谱中距离弹性峰100~200eV之外),可以仅观察到强的弹性峰和第一个等离激元损失峰。

对于更高的能量损失,在能谱中可以观察到对应于原子内壳层电子激发的边沿(比等离激元损失的强度低)。这些边沿随着能量损失的增加而缓慢地下降。台阶或者陡增能量的位置,对应的是电离阈值。由每个边沿的能量损失可近似地估计出非弹性散射过程中内壳层能级的结合能。

当能量分辨率高于 2eV,在低能损失峰和电离阈值边界可以观察到与靶材的能带结构和结晶特性有关的细节特征。例如,根据碳的结构,可在能谱中的不同能量处观察到碳的等离激元峰。这是由于碳的同素异形体,如金刚石、石墨、C<sub>60</sub>、玻璃碳和不定性碳<sup>[22,23]</sup>,具有不同的价电子密度。

关于电子能量损失谱更详细的论述可参考 Egerton 的书<sup>[22]</sup>。

---

### 1.3 俄歇电子峰

由于存在双电离原子,因此在能谱中同样可以观察到俄歇电子峰。俄歇<sup>[38]</sup>和迈特纳<sup>[39]</sup>均在充满惰性气体的 X 射线辐射云室中,发现了从共同起始点出发的成对粒子轨迹。其中一条轨迹具有与入射辐射能量相关的可变波长,另一条轨迹具有确定波长。俄歇指出了气体中双电离原子的存在。两年后,温泽尔(Wentzel)提出了两步过程的假说。在 Wentzel 的假设中,初始电离是一个衰变的过程<sup>[40]</sup>。入射辐射电离了原子系统的 S 内壳层,于是该原子系统基于两种不同机制之一而衰减。其中一种机制是辐射机制:电子从 R 外壳层跃迁到 S 内壳层,并发射一个光子。另一种机制是非辐射机制:电子从 R 外壳层跃迁到 S 内壳层,额外的能量使 R' 外壳层的电子(俄歇电子)发射。这两个过程是相匹配的。在电子能谱中,由非辐射过程产生的俄歇电子峰是可以识别的。

---

### 1.4 二次电子峰

由级联散射过程产生的二次电子是通过非弹性电子-电子碰撞从原子中发射出来的。实际上,并不是所有产生的二次电子都能从固体靶材中出射。为了从表面出射,固体中产生的二次电子必须到达表面并满足一定的角度和能量条件。当然,只有从靶材中逃逸的二次电子才能包括在能谱中。在能谱中,50eV 以下的能量范围会存在一个明显的峰,该峰代表了二次电子的能量分布。通常,二次电子发射系数也是测量 0~50eV 范围内能谱的面积积分(该方法包括了背散射电子的一小部分,这部分能量区域的背散射电子数量实际上是可忽略的,除非初始电子能量非常低)。

---

## 1.5 材料的表征

材料中电子输运过程的模拟在许多应用中都非常重要。粒子束辐照固体产生电子发射的测定尤为关键和重要,特别是在利用电子研究固体近表面的化学和成分特性的分析技术中。

在研究电子和物质的相互作用中,电子光谱仪和显微镜代表了研究物质的电子和光学特性的基本仪器。电子光谱仪和显微镜可用于研究化学成分、电子特性和材料的晶体结构。基于入射电子能量的不同,可以利用一系列的光谱技术:低能电子衍射(LEED)可用于研究表面的晶格结构;俄歇电子谱(AES)可用于分析固体表面的化学成分;电子能量损失谱,不管是分光仪与透射电镜相结合的透射谱还是反射谱,都可通过与合适的标准对比其等离激元损失峰的形状、带内和带间跃迁产生的细微结构特征来表征材料特性;弹性峰电子能谱是可用于检测碳基材料中的氢的一种有用手段。

采用电子探针研究材料的特性需要相应的电子与所研究的特定材料相互作用的物理过程的知识。例如,原子谱的典型 AES 峰的宽度范围为  $0.1 \sim 1\text{eV}$ 。固体中,许多能量上很接近的能级都在此范围,所以在固体的 AES 谱中观察到的峰都较宽。这一特征同样依赖于仪器的分辨率。能谱的另一重要特性是峰的能量偏移与化学环境相关:实际当原子作为固体的一部分时,原子核的能级是偏移的。当从理论上或通过与合适的标准对比能确定该偏移时,这一性质可用于表征材料。甚至能谱强度的改变和二次电子峰的出现都可用于分析未知材料。电子能谱也可用于自支撑薄膜的局部厚度测量、多层表面薄膜厚度测量、半导体中掺杂剂量的确定、辐射损伤研究等。

背散射电子系数可用于沉积层薄膜厚度的无损预测<sup>[41,42]</sup>,同时,在背散射电子能量分布的研究中,可以通过等离激元损失峰的形状表征材料<sup>[43,44]</sup>。

二次电子的研究可通过模拟二次电子成像的物理过程以获得临界尺寸<sup>[45-47]</sup>。通过二次电子可研究 P-N 结的掺杂对比度,以及精确评估最先进 CMOS(互补金属氧化物半导体)工艺的纳米技术<sup>[48,49]</sup>。

---

## 1.6 小结

蒙特卡罗输运仿真是一种用于描述与电子束与固体靶材相互作用相关的许多重要过程的非常有用的数学工具。尤其是固体材料的背散射电子发射和二次电子发射都需要采用蒙特卡罗方法来研究。