

固体金属二次电子发射的 Monte-Carlo 模拟^{*}

常天海 郑俊荣[†]

(华南理工大学电子与信息学院, 广州 510640)

(2012 年 6 月 1 日收到; 2012 年 7 月 14 日收到修改稿)

二次电子的发射在生产实践中有着广泛的应用, 但其相关测量结果受实验环境和实验仪器的影响很大, 在实验中难以精确测量. 所以本文建立了一个包含二次电子激发、在固体内部传输和最后逸出固体表面的二次电子系统模型. 采用 Monte-Carlo 的模拟方法仿真二次电子运动轨迹, 定量分析二次电子的发射系数和能谱分布. 并探讨它们与一次电子的入射角度和入射能量的关系. 仿真结果表明: 本文建立的二次电子系统模型能较好地反映实际情况. 通过该模型仿真, 可以定量得到二次电子发射系数和能谱分布与一次电子的入射能量和入射角度的关系.

关键词: 二次电子, Monte-Carlo, 发射系数, 能谱分布

PACS: 14.60.Cd, 21.60.Ka

1 引言

当具有一定能量的带电粒子入射到物体内部时, 能检测到有电子从这些物体中发射出来, 这就是二次电子的发射. 随着对二次电子理论的进一步深入研究, 二次电子的发射特性也在很多关键行业和领域得到许多应用. 例如, 电子成像^[1], 卫星表面材料选择^[2]都与二次电子发射有密切的关系.

对于二次电子发射的研究目前主要有两种思路. 一种是基于硬件实验的研究方法, 通过实验的手段, 设计和利用相应的设备进行测量, 如美国的 ORNL, SLAC, BNL, 日本的 KEK, 欧洲的 CERN 和国内的研究所以等许多实验室在这方面都做了很多工作^[3,4].

另一种是基于软件仿真的研究方法, 通过计算机对二次电子来进行仿真模拟, 其中最典型的方法就是进行 Monte-Carlo 模拟. 目前, 对于电子的 Monte-Carlo 仿真主要是针对一次电子, 例如在文献 [5—7] 中, 利用 Monte-Carlo 模拟方法研究电子束光刻技术和电子与固体相互的作用. 但对于二

次电子的 Monte-Carlo 模拟却比较少, 因为二次电子的能量往往比较低, 传统的 Rutherford 微分散射截面和能量连续均匀损失的 Bethe 公式已不再适用. 文献 [8] 中提出了基于分波法的 Mott 微分散射截面和 Full Penn 介电函数的模型, 但该模型计算极其复杂.

本文在前人已经推导出的散射截面的基础上, 建立了一个针对二次电子发射的系统模型. 通过这个系统模型能较准确获得二次电子的发射系数曲线. 再使用控制变量法, 研究二次电子发射系数和能谱分布与入射电子的能量和入射角度之间的关系, 揭示二次电子的发射机理.

2 二次电子发射模型

2.1 弹性散射截面模型

电子与固体相互作用的过程中, 会发生只有角度偏转, 而能量没有损失的碰撞. 这种碰撞过程可用弹性散射截面来描述. 由于二次电子的能量一般较低, 传统的 Rutherford 微分散射截面已不适

^{*} 国家自然科学基金科学部主任基金 (批准号: 51047002) 资助的课题.

[†] E-mail: thchang@scut.edu.cn

用, 本文采用精度较高的 Mott 微分散射截面.

Mott 所给出的是电子在裸核库仑场中的散射微分截面, 其解析表达式是 [9]

$$\sigma_M = \left[\frac{2(1 - \cos \theta)}{(1 + \tau)^2} |F|^2 + \frac{2p^2(1 - \cos \theta)^2}{(\alpha Z)^2(1 + \tau)^2(1 + \cos \theta)} |G|^2 \right] \sigma_R, \quad (1)$$

其中, θ 是入射角, p 是以 $m_e c$ 为单位的电子初始动量, τ 是以电子静止能量为单位的电子初始动能, Z 是靶元素的原子序数, $\alpha = 7.297353 \times 10^{-3}$ 是精细结构常数, σ_M 是 Mott 微分弹性散射截面, σ_R 是 Rutherford 微分弹性散射截面 [10], F 和 G 是两个复函数, 其计算方法可以参考文献 [9].

为了提高模拟计算的速度, 采用 Browning 等人在 Mott 弹性散射截面数据的基础上拟合出了一个简单且准确的 Mott 总弹性散射截面公式 [11]:

$$\sigma_{Mt} = 4.7 \times 10^{-18} \times \frac{(Z^{1.33} + 0.032Z^2)}{E + 0.0155Z^{1.33}E^{0.5}} \times \frac{1}{1 - 0.02Z^{0.5}e^{u^2}}, \quad (2)$$

其中 $u = \log_{10}(8EZ^{-1.33})$.

2.2 非弹性散射截面模型

根据二次电子不同的激发机理, 非弹性碰撞可以分为单电子激发和等离子激发. 而单电子激发又可分为导带电子激发和壳层电子激发.

壳层电子激发电子能量损失的微分散射截面可以用 Gryzinski [12] 公式计算:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_s(\Delta E)}{d\Delta E} &= \frac{k_j \pi e^4}{(\Delta E)^3} \left(\frac{E_j}{E + E_j} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{\frac{E_j}{(E_j + \Delta E)}} \\ &\times \left[\frac{\Delta E}{E_j} \left(1 - \frac{E_j}{E} \right) + \frac{4}{3} \ln \left(2.7 + \left(\frac{E - \Delta E}{E_j} \right)^{1/2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

式中 E_j 和 K_j 分别为 j 壳层的束缚能和电子数. ΔE 为损耗能量.

导带电子激发微分截面由 Streitwolf 公式 [13]

给出:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_c(\Delta E)}{d\Delta E} &= \frac{N\pi e^4}{E} \frac{1}{(\Delta E - E_F)^2} 2.715, \\ E_F &< \Delta E \leq E, \\ \frac{d\sigma_c(\Delta E)}{d\Delta E} &= 0.34 \frac{N\pi e^4}{E} \frac{1}{E_F^2}, \\ E_F &\leq \Delta E \leq 2.715E_F, \end{aligned} \quad (4)$$

其中, N 是阿伏加得罗常数, E_F 是费米能.

等离子激发的总截面可通过“准粒子法” [14] 严格导出的公式计算:

$$\sigma_P = \frac{Z}{N\rho} \frac{\hbar\omega_P}{2a_0 E} \ln \left(\frac{\sqrt{E_F + \hbar\omega_P} - \sqrt{E_F}}{\sqrt{E} - \sqrt{E - \hbar\omega_P}} \right), \quad (5)$$

其中 $\hbar\omega_P$ 为等离子能, $\hbar$ 为约化普朗克常数, $a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ cm 为 Bohr 半径, ρ 为固体密度, ω_P 为等离子频率.

3 二次电子模拟流程

下文中 $R_1 - R_7$ 都是 (0, 1) 区间均匀分布的随机数.

总散射截面可以表示为

$$\sigma_t = \sigma_M + \sigma_s + \sigma_c + \sigma_p, \quad (6)$$

σ_M , σ_s , σ_c 和 σ_p 分别为弹性散射截面、壳层电子激发截面、导带电子激发截面和等离子激发截面.

碰撞类型的判定方法如下所示:

$R_1 < \sigma_M/\sigma_t$, 弹性散射,

$\sigma_M/\sigma_t \leq R_1 < (\sigma_M + \sigma_s)/\sigma_t$, 壳层电子激发,

$(\sigma_M + \sigma_s)/\sigma_t \leq R_1$

$< (\sigma_M + \sigma_s + \sigma_c)/\sigma_t$, 导带电子激发,

$(\sigma_M + \sigma_s + \sigma_c)/\sigma_t \leq R_1$, 等离子激发. (7)

电子散射的自由程可由下式计算得到:

$$\lambda = -\frac{A}{\sigma_t N_A \rho} \ln R_2. \quad (8)$$

对于出射电子的散射角的抽样, 弹性散射和非弹性散射有不同的处理方法. 当发生弹性散射时

$$R_3 = \frac{\int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta}. \quad (9)$$

对于非弹性碰撞, 可用基于两体碰撞理论的自由电子模型来计算非弹性散射角 θ :

$$\sin^2 \theta = \frac{\Delta E}{E}. \quad (10)$$

对于方位角 φ , 不管是弹性碰撞还是非弹性碰撞都可以认为是各项同性的, 因此可以由下式计算得到:

$$\varphi = 2\pi R_4. \quad (11)$$

当发生非弹性碰撞时会伴随着能量的损失, 这部分能量一部分用于电子克服原子势能, 激发二次电子, 而另一部分则成为二次电子的动能. 对于单电子激发可以由下式计算可得:

$$R_5 = \frac{\int_{E_0}^{\Delta E} \left[\frac{d\sigma(\Delta E)}{d(\Delta E)} \right] d\Delta E}{\int_{E_0}^E \left[\frac{d\sigma(\Delta E)}{d(\Delta E)} \right] d\Delta E}, \quad (12)$$

$\frac{d\sigma(\Delta E)}{d(\Delta E)}$ 为非弹性散射微分截面, 对于导带电子激发 E_0 为费米能, 对于壳层电子激发 E_0 为电子束缚能. 对于等离子激发由于没有相应的能量损失微分截面, 所以引入能量损失率的概念^[15], 由等离子激发引起的能量损失率可由下式计算得到:

$$\frac{dE}{dS} = \frac{E_p^2}{2a_0 E} \ln \left(\frac{\sqrt{E_p + E_F} - \sqrt{E_F}}{\sqrt{E} - \sqrt{E - E_p}} \right), \quad (13)$$

其中 E_p 为等离子能.

二次电子的初始能量则由下式决定:

$$E_{se} = \Delta E - E_0. \quad (14)$$

对于二次电子的初始散射角, 若判定为单电子激发, 则可以通过解两体碰撞动量守恒方程以确定被激发出的导带电子、壳层电子的散射角和方位角. 而对于等离子激发, 则可由下式计算得到^[8]:

$$\theta = \cos^{-1}(1 - R_6), \quad (15)$$

$$\varphi = 2\pi R_7. \quad (16)$$

二次电子的逸出过程即二次电子穿越表面势垒的过程, 对二次电子发射时的能量与角度分布有重要的影响. 当电子从固体内部出射时, 能量将发生变化

$$E' = E - W_F, \quad (17)$$

其中 E' 是出射后的能量, E 是出射前的能量, W_F 为功函数. 同时出射角度也将发生变化, 由平行于表面的动量分量在出射前后守恒可以得到

$$\sqrt{E'} \sin \theta' = \sqrt{E} \sin \theta. \quad (18)$$

4 实验仿真结果与分析

4.1 二次电子在金属内部的运动轨迹

图 1 是在金属 Al 中不同的一次电子入射能量下电子的三维运动轨迹. 从图中可以看到, 入射电子的能量越高, 激发的二次电子数目越多, 运动范围更深更广. 从图中还可以发现电子运动轨迹上有许多“节点”, 这正是激发的二次电子. 由于激发的二次电子的能量一般要远小于入射电子的能量, 因此其平均自由程也要远小于入射电子, 所以从图上可以看到激发的二次电子只是在激发点附近运动, 因此看上去就像一个个“节点”. 当然有个别的二次电子可能会获得较大的能量, 因此会有较大的自由程, 从而形成“分枝”结构.

表 1 给出了在不同的入射能量下在金属 Al 内部所产生的二次电子的数目, 这是在实验中无法直接测量的. 入射电子数目为 100, 垂直入射. 从表中数据可以看出, 二次电子数目随入射能量的上升而增加, 而且增长的速度越来越快.

但实际逸出的二次电子数目并不是随着能量不断增长, 而是有一个最大值, 此时对应最大的二次电子发射系数. 这说明并不是所有的二次电子都能逸出固体表面. 图 2 是对二次电子激发的位置深度进行概率统计. 从中可以看出, 二次电子激发主要在电子行程的后程, 而入射电子能量越高, 入射的深度越深, 所以即使激发了大量的二次电子也很难从金属表面逸出.

4.2 金属的二次电子发射系数

以金属 Al 为例, 统计其在不同的入射能量下的逸出电子数, 入射电子数目为 1000, 垂直入射. 逸出电子与入射电子之比就是发射系数.

二次电子的发射系数如图 3 中的实线所示.

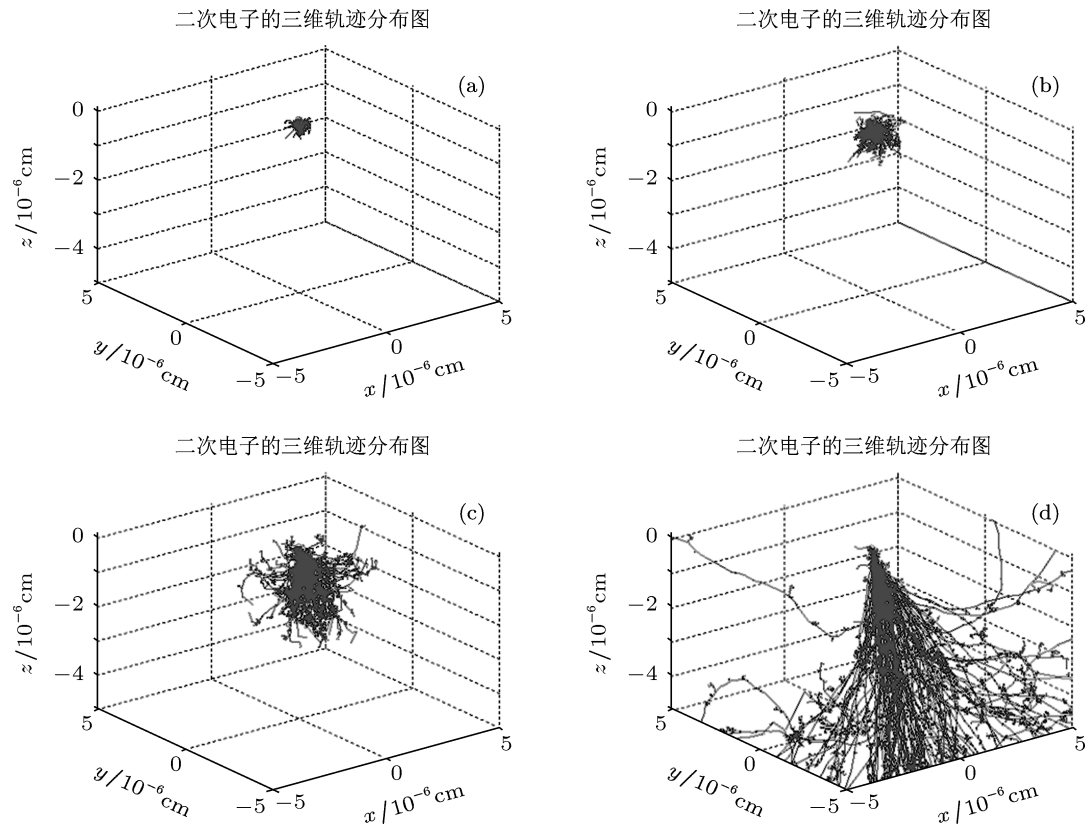


图1 二次电子的三维运动轨迹分布图 (a) 入射能量为 500 eV; (b) 入射能量为 1000 eV; (c) 入射能量为 2000 eV; (d) 入射能量为 5000 eV

表1 不同入射能量下的二次电子激发数目

入射能量 E/eV	50	100	200	500	1000	2000	5000
二次电子数目	84	175	439	1415	3428	8129	21094

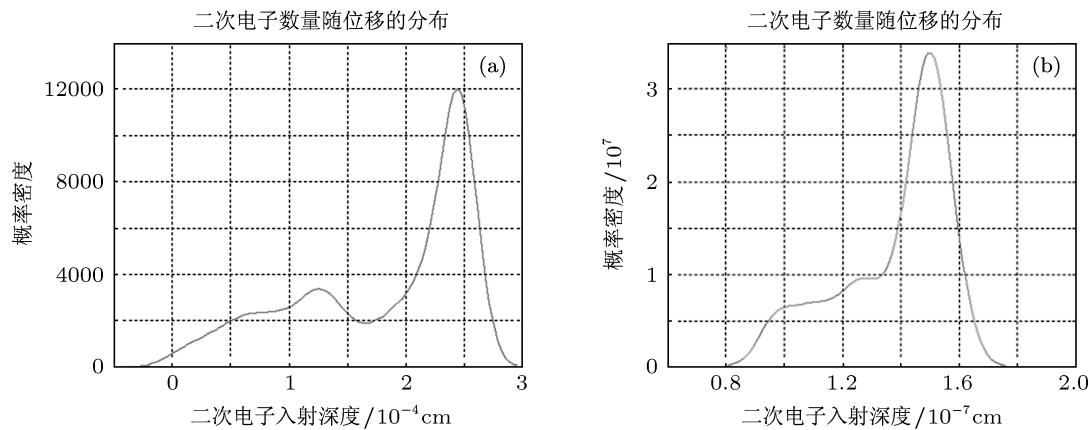


图2 二次电子数目随位移的分布 (a) 入射能量为 500 keV; (b) 入射能量为 1 keV

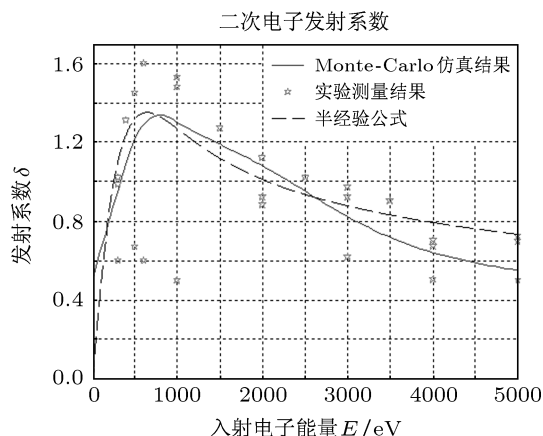


图3 发射系数随能量的变化曲线

从图中的实验测量结果^[8,16-18]中可以发现实际测量的数据结果偏差很大,这主要是因为二次电子的测量受实验环境的影响很大,尤其是入射能量较低时,更容易受到干扰.图中的半经验公式曲线是Young等人在实验数据的基础上总结出来的^[19],本实验结果不管是与实验测量结果,还是与半经验公式都是比较符合.二次电子的发射系数曲线是随能量快速递增至最大值,再缓慢递减的过程.这是因为当能量较低时,激发的二次电子数目较少,随着能量的增加,激发的二次电子数目越来越多,表现为二次电子发射系数增加,但能量越大,入射电子进入到固体内部越深的地方,虽然产生大量的二次电子,但这些二次电子很难从固体内部深处运动到固体表面逸出.

用同样的处理方法,统计在不同的入射角度下的逸出电子数,如图4所示.两条拟合曲线^[8,20]是前人根据实验测量结果归纳推导得到的.当入射角度较低时,从图中可以看到,二次电子的发射系数随着入射角度的增长而不断增长,而且增长的速度起初是越来越快.二次电子产额随着入射角度增加而增加是由于入射电子能够在二次电子可逸出的范围内将产生更多的二次电子.当入射角度较低时仿真结果与拟合曲线比较符合.但随着角度的增大,发射系数的增长速度变得越来越慢,甚至反而下降了.拟合曲线与仿真结果出现较大分歧,两条拟合曲线都是递增型的,而且增长速度越来越快,这与二次电子发射系数随角度的变化规律不相符合.显然二次电子的发射系数不可能无限增长.因为在这种大角度入射的情况下,电子与固体相互作用的体

积相对于垂直入射时严重减小,从而导致大量电子未能在固体中激发更多的电子就已被散射出表面.二次电子发射系数应该要下降,因此此时的拟合公式已不适用.

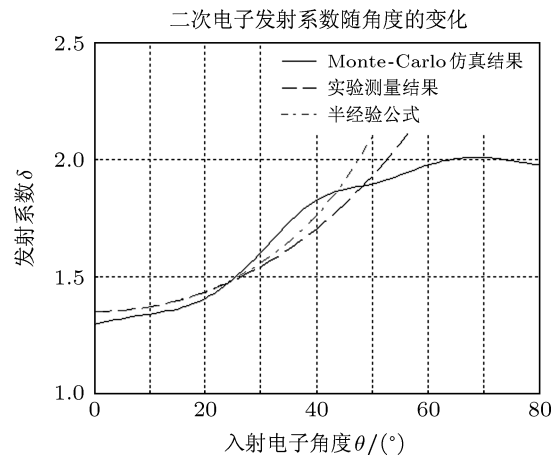


图4 发射系数随角度的变化曲线

4.3 金属的二次电子能谱分布

二次电子能谱分布具有重要的研究意义,已成为材料表层结构分析和表面物理研究的一种有效手段,本文着重探讨二次电子能谱分布与入射能量和入射角度之间的关系.

图5是在不同入射能量下的二次电子分布图,入射角度为70°.从图中可以看到能谱分布上有两个波峰,一个波峰在20 eV附近,而另一个波峰与入射电子能量相当,只有少许的能量损失.这和文献^[3,21]在实验的基础上归纳得到的二次电子能谱分布图的结论一致,如图6所示.

在20 eV附近产生的波峰与入射的电子能量无关,该部分的逸出电子主要是由真二次电子组成,这部分粒子占了逸出电子总数的绝大多数.而另一个波峰与入射电子能量相当,这是弹性散射电子,是由入射电子直接反射,或在样品内部运动一段较短距离后逸出的电子,该部分电子的能量损耗很少,只在逸出过程中有几次非弹性碰撞和克服样品表面势能过程中损失部分能量.而在这两个波峰之间的电子数目极少,这部分电子的能量分布范围很广,主要是一些在样品内部经过多次非弹性碰撞才逸出的入射电子,属于背散射电子的一部分.或者是得到较高能量的二次电子,经过少数的非弹性碰撞

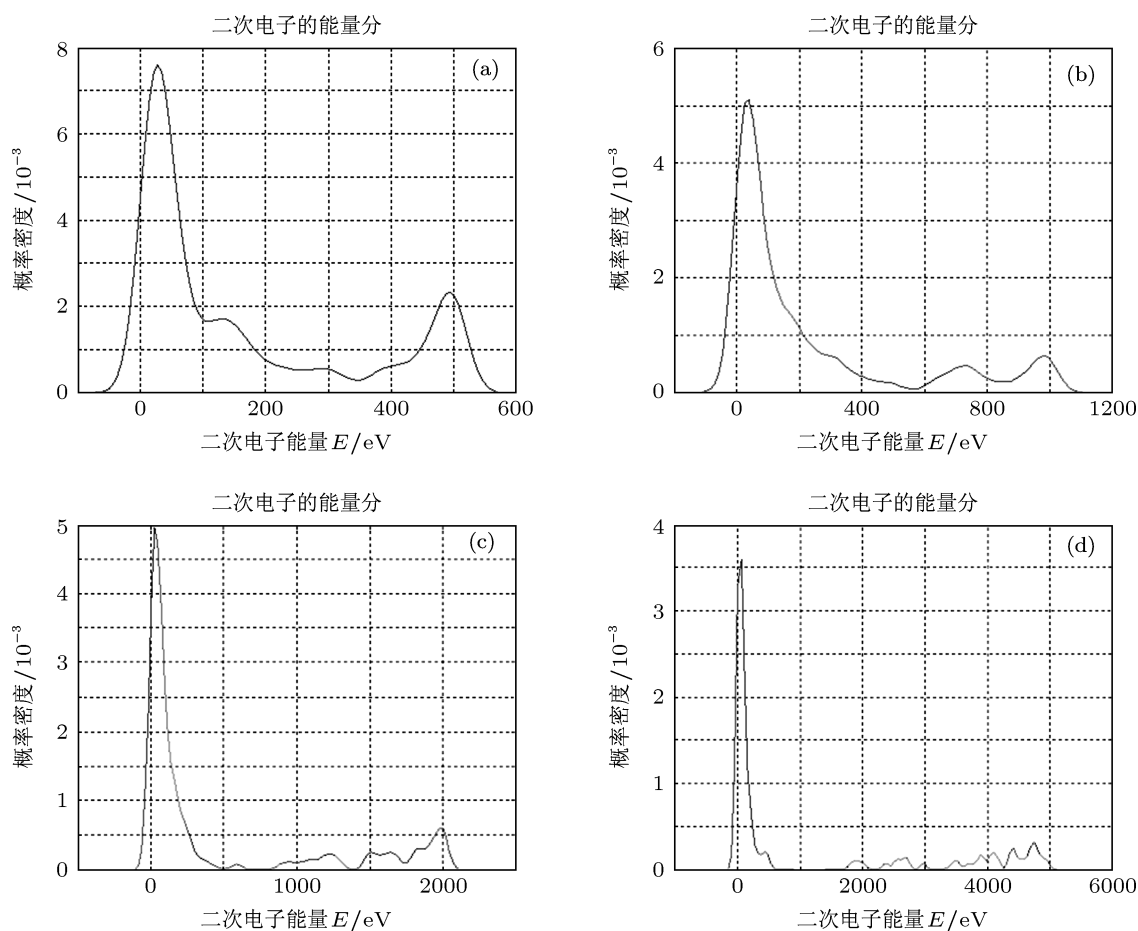


图5 不同入射能量下的二次电子能谱分布 (a) 入射能量为 500 eV; (b) 入射能量为 1000 eV; (c) 入射能量为 2000 eV; (d) 入射能量为 5000 eV

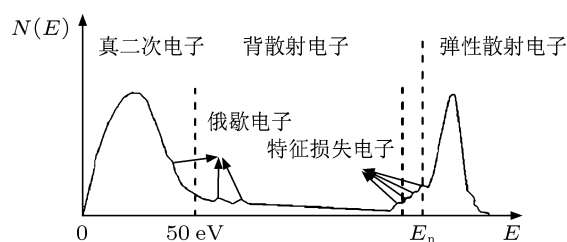


图6 典型的二次电子能谱图 [3]

就逸出了, 所以相比其他真二次电子, 这部分真二次电子有较高的能量。

对于不同入射电子能量, 最大的区别在与第二个波峰, 当入射电子能量较低时, 第二个波峰很明显, 但当入射电子能量较高时, 第二个波峰就变得很小了。这种现象的出现是由平均自由程与能量之

间的关系所决定的, 平均自由程会随着能量增大而增大, 也就是说, 入射电子能量较高时电子更容易运动到固体深处。传统的实验也测的当能量较大时, 铝的背散射系数反而会降低 [22], 所以能量越高, 第二个波峰反而不明显。

图7是在不同入射角度下的二次电子的能谱分布。从中可以发现当入射的角度较小时, 真二次电子的波峰明显高于背散射电子。随着角度的增大, 真二次电子的波峰越来越低, 背散射波峰波峰越来越高。造成这种情况的原因主要是当入射角度较小时, 背散射系数较小, 入射电子与样品充分接触, 激发出较多的真二次电子。但随着入射角度的增加, 背散射系数逐渐增大, 入射电子与固体接触的时间很短就已经逸出了样品表面, 因此产生的真二次电子比较少。

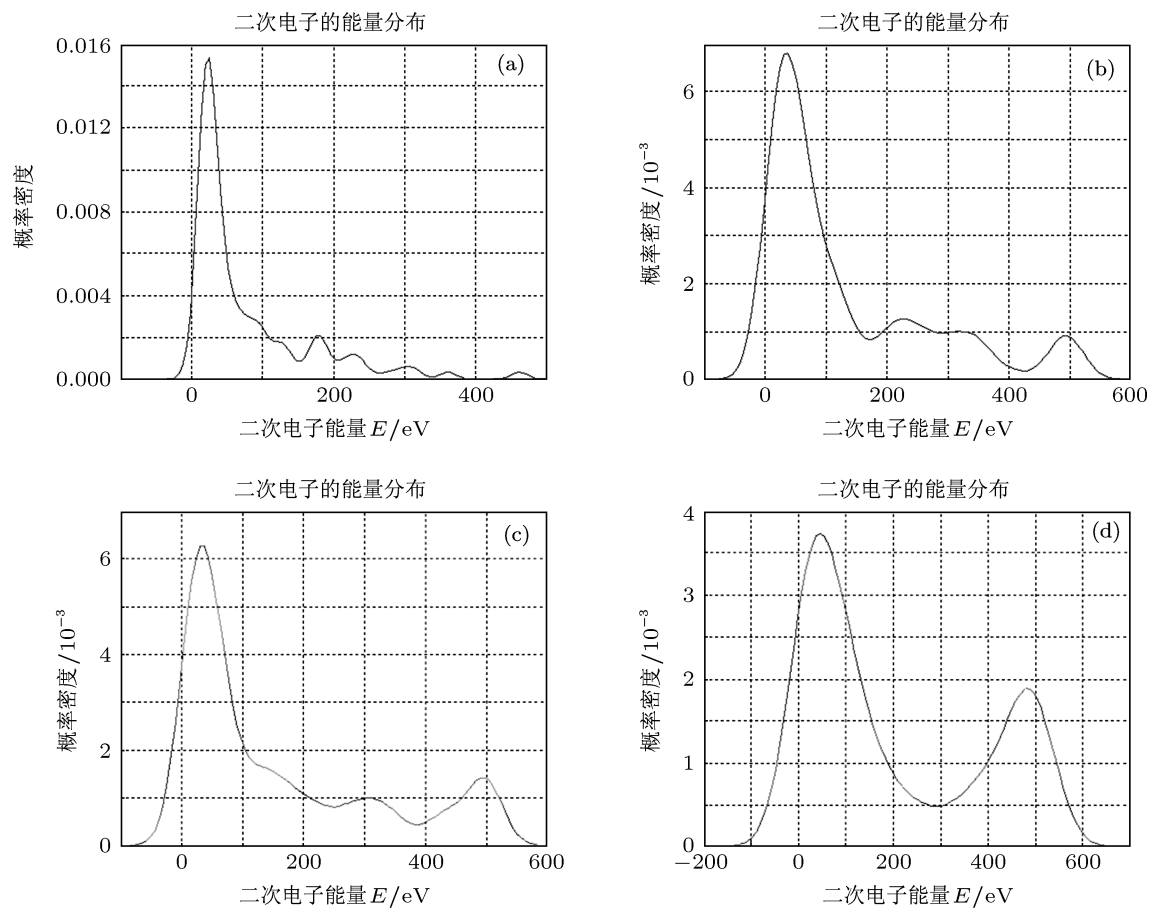


图7 不同入射角度下的二次电子能谱分布 (a) 入射角度为 0° ; (b) 入射角度为 60° ; (c) 入射角度为 70° ; (d) 入射角度为 85° ;

5 结论

本文通过建立一个针对二次电子发射的系统模型,模拟了电子在金属内部的运动轨迹.研究了二次电子的发射系数与入射能量和入射角度的关系.发现了二次电子的发射系数曲线是随能量快速递增至最大值,再缓慢递减的过程.二次电子的发射系数也不是传统认为的那样随入射角度的增大而不断增大,在 80° 时发射系数反而下降.二次电子发射系数是表征材料二次电子性质最常用的物理量,因此本文的研究结果具有重要的应用意义,

例如可以根据本文给出的二次电子发射系数特征,通过调节入射能量和入射角度来增强光电倍增管等电子器件的倍增效果,也可以用这种方法来抑制某些器件二次电子的发射,防止由于二次电子发射导致器件工作不稳定.

本文还探讨了二次电子能谱分布与入射能量和入射角度的关系,发现了能谱上存在两个峰值,而且这两个峰值出现的位置一个固定在 20 eV 左右,而另一个与入射能量相当,并且两个峰值的相对大小与入射能量和入射角度密切相关.这对于样品检测和粒子检测具有重要的应用意义.

- [1] Kumagai K, Suzuki M, Sekiguchi T 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 54316
- [2] Balcon N, Payan D, Belhaj M, Tondou T, Inguibert V 2012 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **40** 282
- [3] Chen D X 2011 *M. S. Dissertation* (Guangzhou: South China university of technology) (in Chinese) [陈达新 2011 硕士学位论文 (广州: 华南理工大学)]

- [4] Zhang Z B, Ouyang X P, Xia H H, Chen L, Wang Q S, Wang L, Ma Y L, Pan H B, Liu L Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **54** 5369 (in Chinese) [张忠兵, 欧阳晓平, 夏海鸿, 陈亮, 王群书, 王兰, 马彦良, 潘洪波, 刘林月 2010 物理学报 **59** 5369]
- [5] Nilsson, Bengt A 2011 *J. Vac. Sci. Technol. B* **29** 06F311
- [6] Wang S L, Liu H X, Gao B, Cai H M 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 142105

- [7] Sun X, You S F, Xiao P, Ding Z J 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 148 (in Chinese) [孙霞, 尤四方, 肖沛, 丁泽军 2006 物理学报 **55** 148]
- [8] Mao S F 2009 *Ph. D. Dissertation* (Anhui: University of science and technology of China) (in Chinese) [毛世峰 2009 博士学位论文 (安徽: 中国科学技术大学)]
- [9] Thomas Joseph Quirk IV 2008 *Ph. D. Dissertation* (New Mexico: University of New Mexico) (in American)
- [10] Thompson R L, Gurumurthy S C, Pattabi M 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 43533
- [11] Browning R 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 2845
- [12] Gryzinski M 1965 *Phys. Rev.* **138** 336
- [13] Shimizu R, Ichimura 1983 *Surf. Sci.* **3** 183
- [14] Quinn J J 1962 *Phys. Rev.* **126** 1453
- [15] Song H Y, Zhang Y L, Wei Q, Kong X D 2005 *Microfabrication Technology* **2005**(3) 14 (in Chinese) [宋会英, 张玉林, 魏强, 孔祥东 2005 微细加工技术 **2005**(3) 14]
- [16] David C J 1995 *Scanning* **17** 270
- [17] Xie A G, Zhang J, Liu B, Wang T B 2012 *High Power Laser and Particle Beams* **24** 481(in Chinese) [谢爱根, 张健, 刘斌, 王铁邦 2012 强激光与粒子束 **24** 481]
- [18] Shimizu R 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 2107
- [19] Young J R 1957 *J. Appl. Phys.* **28** 524
- [20] Xue Z Q, Wu Q D 1993 *Electron emission and the electronic energy* (Beijing: Peking University Press) p145 (in Chinese) [薛增泉, 吴全德 1993 电子发射与电子能谱 (北京: 北京大学出版社) 第 145 页]
- [21] Cheng H, Jiang J P 1986 *Cathode Electronics* (Xian: Northwest Telecommunication Engineering Institute Press) p176 (in Chinese) [承欢, 江剑平 1986 阴极电子学 (西安: 西北电讯工程学院出版社) 第 176 页]
- [22] Zhuo J, Huang L X, Niu S L, Zhu J H, 2010 *Chin. J. Comp. Phys.* **27** 805 (in Chinese) [卓俊, 黄流兴, 牛胜利, 朱金辉 2010 计算物理 **27** 805]

Monte-Carlo simulation of secondary electron emission from solid metal*

Chang Tian-Hai Zheng Jun-Rong[†]

(School of Electronic, Information Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510000, China)

(Received 1 June 2012; revised manuscript received 14 July 2012)

Abstract

The secondary electron emission is widely used in production practice, but it is difficult to measure accurately because the measuring result is severely affected by the experimental environment and equipment. A model of secondary electron emission is proposed in this paper. The model has three sections: the generation of secondary electrons, the motions of secondary electrons inside the solid and the escape of secondary electrons from the solid surface. Based on Monte-Carlo method, the relationship between the secondary electron emission coefficient and the range of energy with the energy and angle of the incident electrons is also analyzed. Simulation results show that the model proposed in this paper is corresponding to the actual condition very well. The relation between the secondary electron emission coefficient and the range of energy with the energy and angle of the incident electron is obtained.

Keywords: secondary electrons, Monte-Carlo, electron emission coefficient, range of energy

PACS: 14.60.Cd, 21.60.Ka

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51047002).

[†] E-mail: thchang@scut.edu.cn