

# 近程碰撞对 $\text{He}^+$ 离子诱发背向 电子发射贡献比例的计算

卢其亮 赵国庆 周筑颖

(复旦大学现代物理所应用离子束物理实验室, 上海 200433)

(2002 年 7 月 9 日收到, 2002 年 10 月 14 日收到修改稿)

用 Monte-Carlo 方法模拟了高速  $\text{He}^+$  离子入射到 C, Cu 和 Al 固体表面所诱发的电子发射. 用这个程序计算了背向的电子发射产额, 并且同时计算了近程碰撞对总的背向电子发射产额的贡献比例. 对 C, Cu 和 Al 其值分别是 0.5, 0.55 和 0.42. 对在近程碰撞中产生的高能  $\delta$  电子 ( $E > 100 \text{ eV}$ ) 对背向电子发射行为的影响也进行了详尽地讨论. 只有那些能量为几百个 eV 的  $\delta$  电子对产额的贡献比例较大. 对于 C 靶,  $\delta$  电子对电子阻止本领最大值附近的二次电子发射行为会产生影响. 计算所得到的电子发射产额与实验结果符合得很好.

关键词: 二次电子发射, Monte-Carlo 模拟, 近程碰撞,  $\delta$  电子

PACC: 7900, 3450D

## 1. 引言

快速带电粒子与团体相互作用会导致粒子从固体表面的发射, 尤其是电子的发射, 即“动力学电子的发射”<sup>[1]</sup>. 平均每一个入射离子所诱发的电子数目 (即电子发射产额  $Y$ ) 和电子发射的角分布以及能量分布是研究的重点.

由复合入射粒子诱发的电子的发射是目前热门研究课题. 比如入射粒子是电子被部分剥离的离子 (如  $\text{He}^+$ ), 对它已经做大量的实验<sup>[2-4]</sup>, 但是在理论上还不太充分. 因此对  $\text{He}^+$  离子轰击 C, Al 和 Cu 靶的电子发射行为的理论研究是本文的重点.  $\text{He}^+$  离子穿过一定深度以后其上的束缚电子会剥离掉,  $\text{He}^+$  分裂成电子  $e^-$  和  $\text{He}^{2+}$  离子, 然后这两个粒子也可以看做独立的入射粒子. 因此背向的二次电子总产额  $Y_b$  是  $\text{He}^+$ ,  $\text{He}^{2+}$  和  $e^-$  各自诱发的电子产额  $Y_1$ ,  $Y_2$  和  $Y_e$  之和.

电子的产额与电子阻止本领 (离子在单位长度上的能量损失) 有 (或者大致) 正比例关系<sup>[5]</sup>. 在 Bohr 和 Lindhard<sup>[6,7]</sup> 的经典论述中, 他们认为高速的入射离子的非弹性能量损失可分为两部分, 并且对点电荷而言这两部分的能量损失相等, 即等分定则. 其中一个为远程碰撞, 对应着大的碰撞参数; 另一个是近

程碰撞, 对应着小的碰撞参数. 对应于第一种情况, 引起的是等离子体激发, 产生的是低能电子, 相应的电子产额是  $Y_d$ ; 对应第二种情况, 引起的是单电子激发, 会导致高能电子的产生, 其中能量大于 100 eV 电子通常把它称为  $\delta$  电子, 相应的产额由  $Y_c$  和  $Y_\delta$  表示. 因此总的背向的二次电子的产额  $Y_b$  还可以写为  $Y_b = Y_c + Y_d + Y_\delta$ . 近程碰撞对  $Y_b$  的贡献比例便可以分别定义为  $f_c = Y_c/Y_b$  和  $f_\delta = Y_\delta/Y_b$ . 很明显  $f_\delta$  是  $f_c$  的一部分, 并且从  $\text{He}^+$  上剥离下的电子的贡献没有考虑在  $f_\delta$ ,  $f_c$  之中.

本文用 Monte-Carlo 方法计算了高速  $\text{He}^+$  离子轰击 C, Al 和 Cu 表面所诱发的背向二次电子发射的产额. 计算得到的电子产额与实验结果进行了比较, 主要研究了近程碰撞对总的背向电子发射产额的贡献比例, 并且对在近程碰撞中产生的高能  $\delta$  电子 ( $E > 100 \text{ eV}$ ) 对背向电子产额行为的影响进行了详尽地讨论.

## 2. Monte-Carlo 模拟

Monte-Carlo 方法被大量应用于模拟离子诱发的电子发射过程<sup>[8-10]</sup> 以及电子在固体中的输运过程<sup>[11,12]</sup>. 最近, 我们建立了一个计算  $\text{He}^+$  离子诱发的二次电子发射的 Monte-Carlo 程序. 其基本思想是模

拟入射粒子和激发产生的电子在固体中运动的轨迹.假定入射粒子由于两体碰撞改变方向,在两次碰撞之间是直线自由飞行的.对于入射离子在固体靶的传输,其弹性碰撞按 Biersack 和 Haggmark 公式<sup>[13]</sup>处理. He<sup>+</sup> 离子在固体中的主要过程是:首先以有效电荷为  $Z_{\text{eff}}$  的 He<sup>+</sup> 穿行(  $Z_{\text{eff}}$  可以根据文献[14]计算得到)在穿行深度大于束缚电子剥离平均自由程  $\lambda_0(E_0)$  (它可以由文献[15]得到)以后, He<sup>+</sup> 分裂成了 He<sup>2+</sup> 和 e<sup>-</sup>, 然后这两个粒子又各自激发产生电子.

通常情况下,固体的电子结构可以分为具有分离能级的内壳层电子和由自由电子气模型描述的导带电子.氦离子可以从导带和靶原子的内壳层激发出电子.激发出来的电子在靶中经过弹性和非弹性散射,这些电子又可以激发电子即级联电子.所有这些电子都被跟踪,直到它们离开靶的表面或者能量低于一定值而停留在固体中.

### 2.1. 电子的激发产生

导带电子激发截面是在 Lindhard<sup>[7]</sup>的介电理论框架内计算得到,而内壳层激发截面可以由 Gryzinski<sup>[16]</sup>经典方法得到.对于导带单电子激发其电子能量是  $\hbar\omega_p \leq \Delta E \leq 2m_e v_0^2$ ,对内壳层激发则是  $\Delta E - E_i$ .特别指出的是,对等离子体激发电子的能量  $\Delta E$  为  $\hbar\omega_p$ .这里的  $\omega_p$  是自由电子气的振荡频率,  $\hbar$  是除以  $2\pi$  的 Planck 常数,  $m_e$  是电子的质量,  $v_0$  和  $E_i$  分别是入射粒子的速度和靶原子内壳层电子的束缚能量.单电子激发和内壳层激发出来的电子的发射角由守恒定律决定;对等离子体激发则认为各向同性的.

### 2.2. 电子的级联

激发出来的电子又可以通过弹性和非弹性碰撞与固体发生作用.动量为  $p$  速度为  $v$  的电子与靶原子的弹性碰撞截面可以由 Liljequist<sup>[17]</sup>在分波法截面计算的基础上,用带有修正因子的屏蔽的 Rutherford 弹性散射截面公式而得到.文献[17]的表中未列出的能量点的值可以通过内插和外推的方法得到.导带电子激发截面  $\sigma_c$  和等离子体激发截面  $\sigma_p$  是由 Tung 和 Ritchie<sup>[18]</sup>在 Lindhard<sup>[7]</sup>介电理论框架内得到的.内壳层激发截面  $\sigma_{in}$  用 Gryzinski<sup>[16]</sup>公式计算.这样总的非弹性散射截面就是  $\sigma_{inel} = \sigma_c + \sigma_p + \sigma_{in}$ .由于非弹性能量散射而导致的能量损失由改进的 Be-

the 公式<sup>[19]</sup>给出:

$$\frac{dE}{ds} = -785 \frac{\rho Z}{AE} \ln\left(\frac{1.16(E + kJ)}{J}\right), \quad (1)$$

这里的  $E$  是以 eV 为单位的电子的能量,  $J = Z(9.76 + 5.88Z^{-1.19})$  eV 是平均离化能,对 C, Al 和 Cu,  $k$  分别为 0.822, 0.841 和 0.851.因此转移给级联电子的能量是  $\Delta E = s(dE/ds) = -\lambda_{inel} \ln(R)(dE/ds)$ ,这里的  $\lambda_{inel} = 1/N\sigma_{inel}$  是非弹性散射的平均自由程,其中  $N$  为靶原子密度,  $0 < R < 1$  则是随机数.散射角  $\theta$  根据下式得到:

$$\cos\theta = 1 - \frac{2\beta R}{1 + \beta - R}. \quad (2)$$

这里  $\beta$  参数:  $\beta = 0.25(1.12\hbar\lambda/p)^2$ ,其中  $\lambda = Z^{1/3}/0.085a_0$ ,  $a_0$  为 Bohr 半径,  $Z$  为靶原子序数.所有被离子激发出来的电子及其级联电子都被追踪.如果电子的能量小于 2.5 eV,则停止跟踪.一部分电子会到达靶的表面,并且如果它的能量大于固体表面功函数  $\phi$ ,那么就会离开表面而被探测到.在整个计算过程中,模拟跟踪了 10000 个入射的 He<sup>+</sup> 离子.

## 3. 结果与讨论

图 1 和图 2 给出了对于 C, Al 和 Cu 以入射能量  $E_0$  为函数的电子发射产额的计算结果,并且与实验结果<sup>[2,3]</sup>进行了比较,计算结果与实验结果符合得很好.

在所考虑的能量范围内, He<sup>+</sup> 离子的有效电荷  $Z_{\text{eff}}$  是随速度增加而增大的,而电子阻止本领  $S_e$  与  $Z_{\text{eff}}$  的平方成正比.另一方面, He<sup>+</sup> 上束缚电子剥离的平均自由程  $\lambda_0(E_0)$  在大约 1000keV 的时候达到最小值.综合考虑这些因素以后, He<sup>+</sup>, He<sup>2+</sup> 和 e<sup>-</sup> 对总的电子发射产额  $Y_b$  的贡献将随能量而变化.

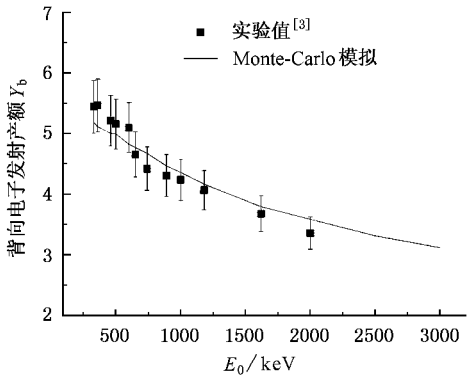


图 1 He<sup>+</sup> 轰击 C 靶的背向二次电子产率  $Y_b$



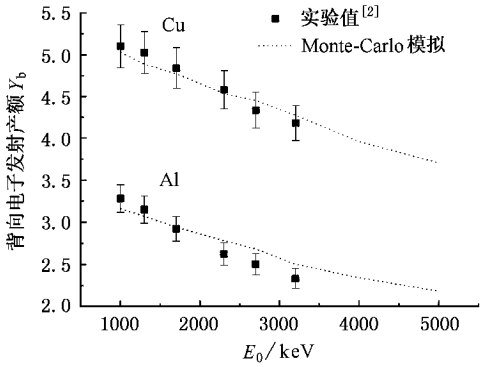


图2 He<sup>+</sup>轰击 Cu 和 Al 靶的背向二次电子产额  $Y_b$

图3和图4分别展示了通过近程碰撞而产生的电子占总的背向发射产额的比例 $f_c$ ,同时也给出了近程碰撞中产生的高能 $\delta$ 电子( $E > 100$  eV)的贡献比例 $f_\delta$ .由图可以看出,对He<sup>+</sup>轰击Al和Cu,在所考虑的能量范围内 $f_c$ 分别是0.42和0.55,而对C, $f_c$ 略大于0.5.由于 $\delta$ 电子的方向分布是前向最大的,因此 $\delta$ 电子本身在背向电子产额中的数量是可以忽略的.然而它在靶内传输的过程中不断的消耗能量,通过非弹性碰撞级联产生更多的低能电子.在图3中, $\delta$ 电子的贡献比例 $f$ 随能量逐渐增加.由于 $\delta$ 电子的最大能量是 $2m_e v_0^2$ ,在入射能量 $E_0$ 较低时,产生的 $\delta$ 电子的平均能量也比较低,因此对总的背向二次电子的产额贡献 $f_\delta$ 也较小.随着入射能量 $E_0$ 的增加, $\delta$ 电子的能量相应的增加,电子的级联碰撞也逐渐变得重要起来,因此对于C $f_\delta$ 逐渐接近于0.24,而对Al和Cu $f_\delta$ 则几乎是一个常数.

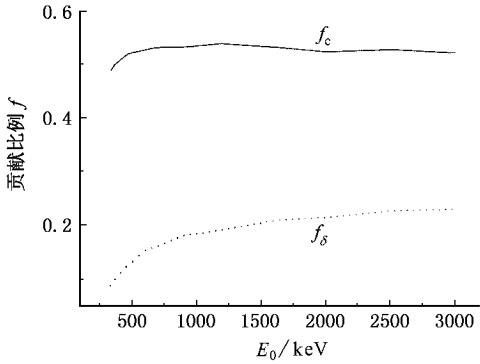


图3 He<sup>+</sup>轰击 C 靶过程中近程碰撞及其中的 $\delta$ 电子对背向二次电子产额贡献比例 $f_c$   $f_\delta$

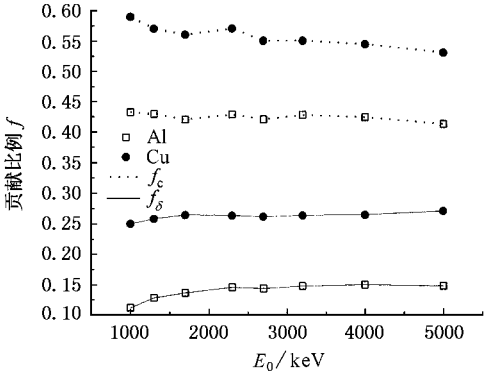


图4 He<sup>+</sup>轰击 Cu 和 Al 靶过程中近程碰撞及其中的 $\delta$ 电子对背向二次电子产额贡献比例 $f_c$   $f_\delta$

根据Trim 96<sup>[20]</sup>可以知道,高速He<sup>+</sup>离子在C中有最大电子阻止本领值时的对应能量为600keV左右.在文献3]中,在电子阻止本领最大值附近,背向二次电子的发射产额与能量有依赖关系,即对应相同的阻值本领电子产额不相等,而按普遍接受的观点,电子产额与阻止本领成正比<sup>[5]</sup>.作者认为这可能是由于 $\delta$ 电子的方向分布是前向最大,而其在固体中的射程随能量相应增大,对于单位长度上沉积相同的能量(即阻止本领), $\delta$ 电子会把更多的能量由固体表面带入固体内部,因而在电子阻止最大值附近,低能端电子产额比高能端的大.从图3我们注意到在330keV至1500keV范围内, $f_c$ 和 $f_\delta$ 都是随能量而缓慢增加的,而 $f_\delta$ 的变化更加明显一些.由于 $\delta$ 电子在背向电子产额中的作用随能量而增加,因此我们认为这对电子阻止本领最大值附近的二次电子发射行为会产生影响.

在图3和图4中,当入射能量大于2000 keV时,一部分 $\delta$ 电子的能量会达到几个keV,在这种情况下, $\delta$ 电子诱发的二次电子和用电子束轰击固体表面诱发二次电子<sup>[21]</sup>的情况是完全类似的,即那些能量较高的 $\delta$ 电子的贡献只占 $f_\delta$ 的一小部分.也就是说, $f_\delta$ 中的主要部分是由那些能量为几百个eV的 $\delta$ 电子诱发的,所以随着入射能量 $E_0$ 的增加, $f_\delta$ 趋向于常数.从图4还可以看出,Cu的 $f_\delta$ 比Al的 $f_\delta$ 值大,这是因为在自由电子气模型中,Cu的电子气振荡频率 $\omega_p$ 要比Al的大.

作者之一卢其亮感谢复旦大学中路-波尔奖学金的支持.

- [ 1 ] Villard M P 1899 *J. Phys. Theor. Appl.* **8** 5
- [ 2 ] Benka O, Pfaffenlehner M and Schinner A 1996 *Nucl. Instrum. Methods*. B **117** 350
- [ 3 ] Wünsch R *et al.* 1998 *Nucl. Instrum. Methods*. B **146** 82
- [ 4 ] Jiang L, Zhou Z Y and Zhao G Q 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 691
- [ 5 ] Sternglass E J 1957 *Phys. Rev.* **108** 1
- [ 6 ] Bohr N 1948 *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. - Fys. Medd.* **18**( 8 ) 1
- [ 7 ] Lindhard J and Winther A 1964 *K. Dan Vidensk. Mat. - Fys. Medd.* **34** 1
- [ 8 ] Caron M *et al* 1998 *Nucl. Instrum. Methods*. B **135** 436
- [ 9 ] Dubus A *et al* 1998 *Nucl. Instrum. Methods*. B **135** 443
- [ 10 ] Steinbauer E, Schinner A and Benka O 2000 *Nucl. Instrum. Methods*. B **171** 291
- [ 11 ] Zhang Lian-zhu *et al* 2001 *Chin. Phys.* **10** 639
- [ 12 ] Tan Z Y and Xia Y Y 2002 *Acta. Phys. Sin.* **51** 1506( in Chinese ) [ 谭震宇、夏曰源 2002 物理学报 **51** 1506 ]
- [ 13 ] Biersack J P and Haggmark L G 1980 *Nucl. Instrum. Methods*. **174** 257
- [ 14 ] Ziegler J F and Manoyan J M 1988 *Nucl. Instrum. Methods*. B **35** 25
- [ 15 ] Kaneko T 1985 *Phys. Rev.* A **32** 2175
- [ 16 ] Gryzinski M 1965 *Phys. Rev.* **138** 336A
- [ 17 ] Liljequist D 1989 *J. Appl. Phys.* **65** 2431
- [ 18 ] Tung C J and Ritchie R H 1977 *Phys. Rev.* B **16** 4302
- [ 19 ] Joy D C and Luo S 1989 *Scanning* **11** 176
- [ 20 ] Ziegler J F, Biersack J P and Littmark U 1985 *The Stopping and Range of Ion in Solids*( New York Pergamon Press )
- [ 21 ] Höher G and Niekisch E A 1991 *Particle Induced Electron Emission* Edited by Springer Tracts in Modern Physics Vol. 122( Berlin Springer )

## Evaluation of the contribution fraction of close collision to the backward electron emission induced by $\text{He}^+$ ion

Lu Qi-liang Zhao Guo-Qing Zhou Zhu-Ying

( *Applied Ion Beam Physics Laboratory, Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China* )

( Received 9 July 2002 ; revised manuscript received 14 October 2002 )

### Abstract

Electron emission for  $\text{He}^+$  incident on solid surfaces of C, Cu and Al was simulated with the Monte-Carlo method. The backward electron emission yields are calculated. The contribution fraction of electrons emitted by close collision to the total backward emission yield is evaluated with this code, and contribution fraction is 0.5, 0.55 and 0.42 for C, Cu and Al, respectively. The effect of high-energy ( $E > 100\text{eV}$ )  $\delta$  electrons on the backward electron yield is also considered in detail, and only those  $\delta$  electrons with an energy of a few hundred eV plays an important role in the backward electron emission. For C,  $\delta$  electrons will affect the behaviour of electron emission yield near the maximum electronic stopping power. Results of yield obtained are compared with experimental data of other authors, and a good agreement is found.

**Keywords** : secondary electron emission, Monte-Carlo simulation, close collision,  $\delta$  electron

**PACC** : 7900 3450D