

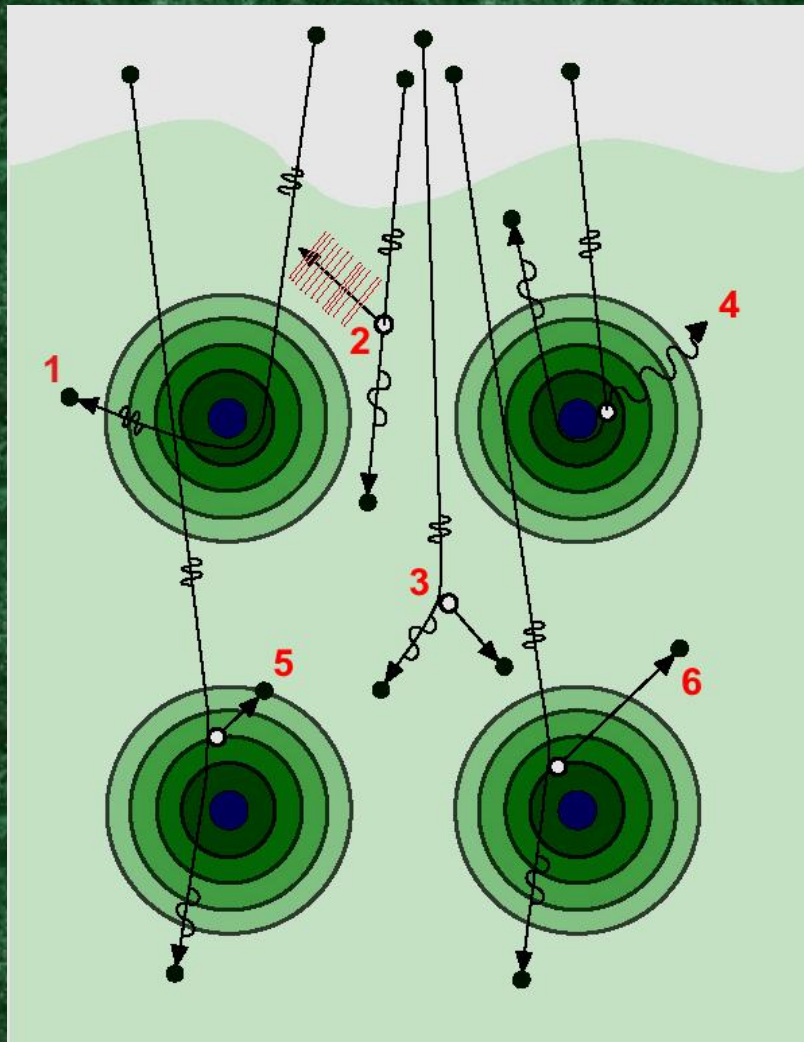
Interakce elektronů s látkou

Luděk Frank

Vymezení problému

Cílem je poskytnout přehled jednotlivých typů interakcí mezi dopadajícím elektronem a pevnou látkou charakterizovanou svým chemickým složením a krystalickou a elektronickou strukturou. Budou popsány jednotlivé typy rozptylových událostí a jejich produkty, statistické parametry rozptylu a mechanismy ovlivnění vzorku bombardovaného elektrony. Jev emise elektronů ze vzorku bude prezentován se svými parametry jakožto nositeli experimentální informace.

Rozptylové události



Pohyb elektronu v poli krystalu je aproximován sledem jednotlivých interakcí mezi „téměř volným“ primárním elektronem a mezi částicemi a poli ve vzorku. Vztahuje se i na částice uvolněné předchozími interakcemi.

- 1 – pružný odraz na jádrech
- 2 – emise plasmonu
- 3 - „Comptonův“ rozptyl
- 4 – emise kvanta brzděného záření
- 5 – vnitro- nebo mezipásový přechod
- 6 – ionizace vnitřní hladiny

Rozptylové události

Základní pojmy:

- pružný rozptyl - interakce, při níž rozptylovaná částice nemění energii, ale mění směr pohybu
- nepružný rozptyl – rozptylovaná částice ztrácí energii excitací záření nebo uvolněním jiné částice; obvykle jen málo mění směr pohybu

Za pružný bývá prohlašován pouze rozptyl na jádrech (atomech, iontech), a to v přiblížení nekonečné hmotnosti terče v pojetí klasické fyziky, resp. nulové pravděpodobnosti přechodu do excitovaného stavu v kvantově mechanickém pojetí. Navíc však při rozptylu na jádrech existují „nepružné jevy“ emise a absorpce fononů a emise brzděného záření.

Rozptyl na elektronech naopak není vždy nepružný – viz nepřímá úměrnost pružného odrazu velmi pomalých elektronů lokální hustotě stavů, tedy elektronické struktury terče.

Pružný rozptyl v klasické mechanice

Základní pojmy:

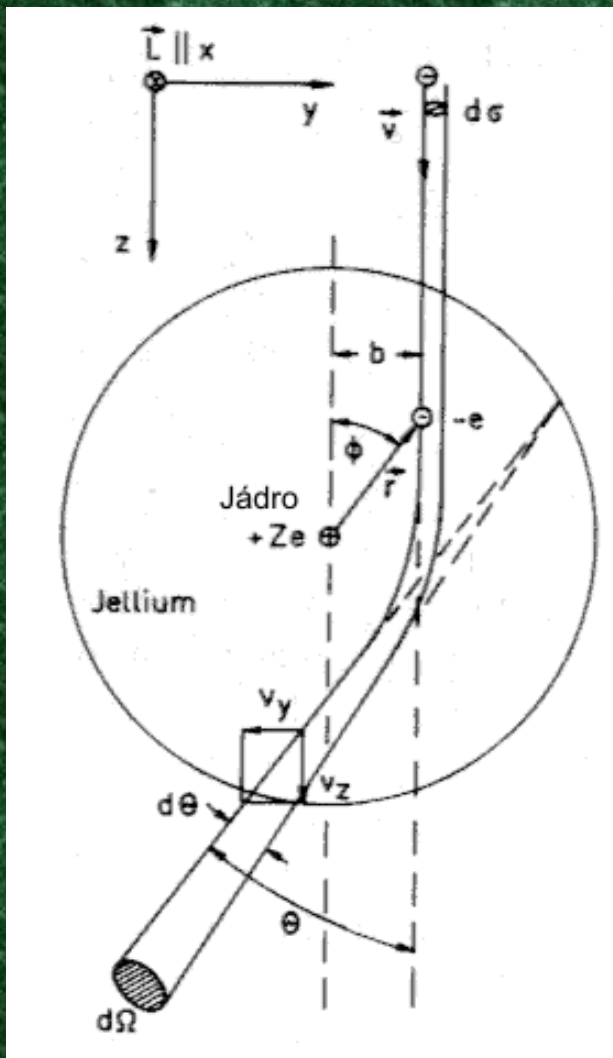
- **Diferenciální účinný průřez $d\sigma/d\Omega$** – pravděpodobnost, že elektron přibližující se k atomu bude rozptýlen do prostorového úhlu $d\Omega$; je funkcí úhlu θ .
- **Účinný průřez σ** – celková pravděpodobnost rozptylu v plošných jednotkách, efektivní plocha terče

V souřadném systému jádra jde o pohyb v centrálním poli bez ztráty energie (viz pohyb planet).
Aproximace: pohybový stav jádra se nezmění (zůstane v klidu), zanedbává se pole elektronů atomu - nestíněné jádro.

Pro energii projektilu E mnohem menší než $mc^2 = 511 \text{ keV}$ platí

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{16(4\pi\epsilon_0)^2 E^2} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

(Rutherfordův rozptyl na nestíněném jádře)



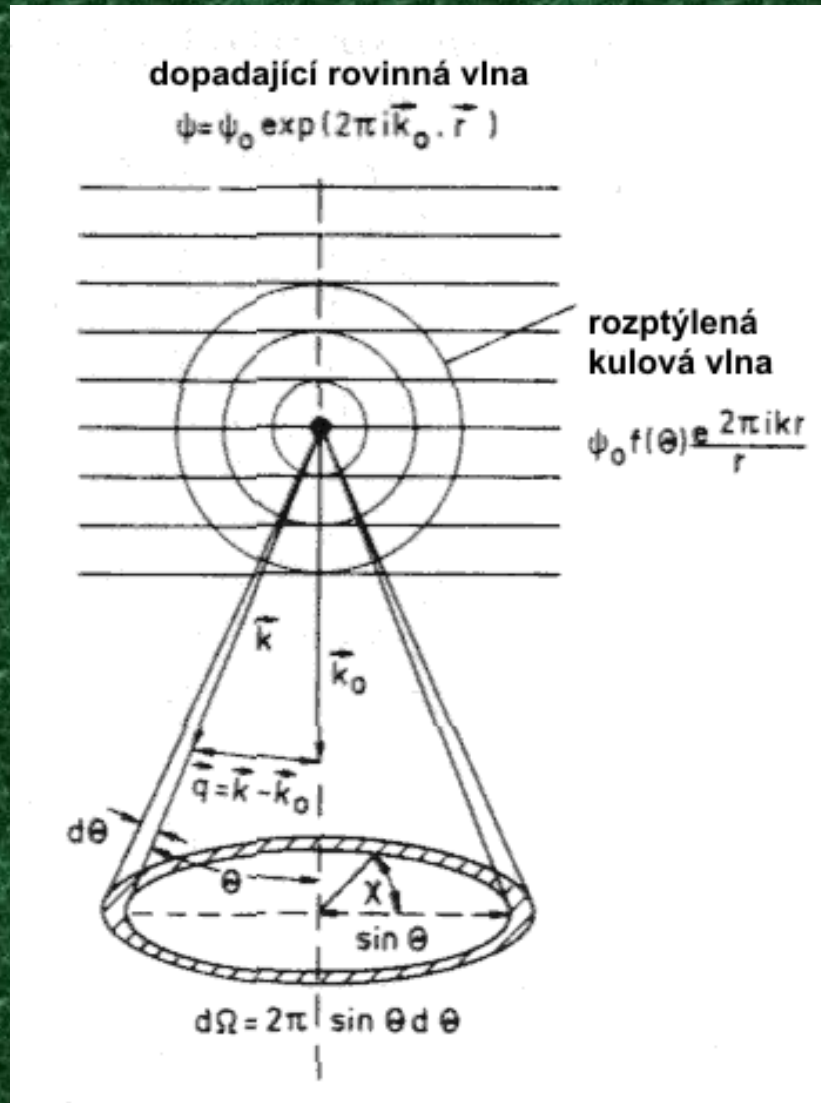
Pružný rozptyl v kvantové mechanice

V dostatečně velké vzdálenosti od rozptylového centra je výsledkem rozptylu superpozice dopadající a rozptýlené vlny a

$$d\sigma_{el}/d\Omega = |f(\theta)|^2$$

TEM : $f(\theta)$ pro $\theta \leq 50$ mrad
 SEM: $f(\theta)$ pro $\theta \in (0, \pi)$

Rozptylová amplituda $f(\theta)$ je řešením Schrödingerovy popř. Pauli-Diracovy rovnice.



Pružný rozptyl v kvantové mechanice

Nerelativistický přístup:

Atom se Z elektrony v základním kvantovém stavu + dopadající elektron

⇒ potenciální energie V
ve Schrödingerově rovnici

$$\nabla^2 \psi = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} \psi$$

Řešení je hledáno ve tvaru superpozice rovinných vln vážených stíněným Coulombovským potenciálem jádra. Nejjednodušší aproximací stíněného potenciálu je Wentzelův model

$$V(r) = -\frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-r/R_S}, \quad R_S = a_H Z^{-1/3}, \quad a_H = 0.057 \text{ nm}$$

Výsledkem je diferenciální účinný průřez

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{16(4\pi\epsilon_0)^2 E^2} \frac{1}{\left[\sin^2(\theta/2) + \sin^2(\theta_0/2)\right]^2}$$

s charakteristickým úhlem $\theta_0 \cong 2^\circ \div 9^\circ$ pro 10 keV a $Z \in 1 \div 90$

Pružný rozptyl v kvantové mechanice



Relativistický přístup:

Stíněný potenciál krystalu, tzv. muffin-tin model,

$$V_{MT}(r) = V(r) + V(2a-r) - 2V(a) \quad \text{pro } r \leq a, \quad V_{MT}(r) = 0 \quad \text{pro } r > a$$

a Pauli-Diracova rovnice

$$\left[H - V - c \sum_i \alpha_i (p_i - eA_i) - \beta E_0 \right] \psi = 0$$

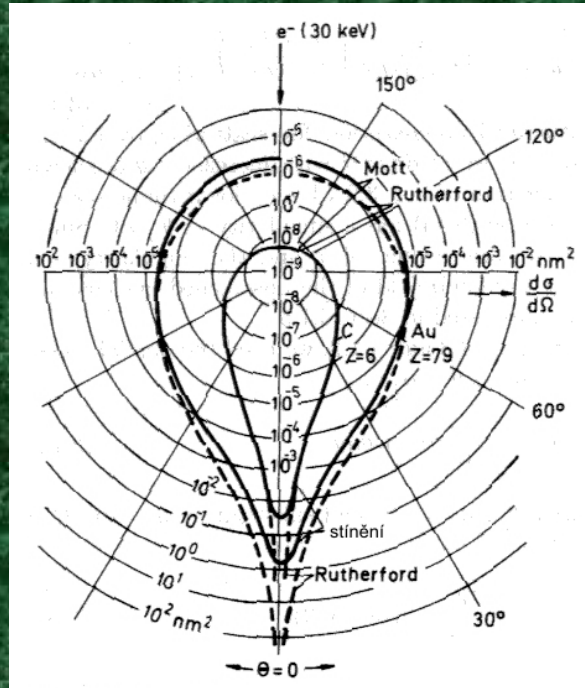
p_i, A_i – složky impulsu resp. magn. vektorového potenciálu, E_0 – klidová energie elektronu (511 keV), α_i a β – Diracovy matice 4×4

Řešení pro spinově nepolarizovaný svazek elektronů (tzv. Mottův účinný průřez):

$$d\sigma_{el}/d\Omega = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2$$

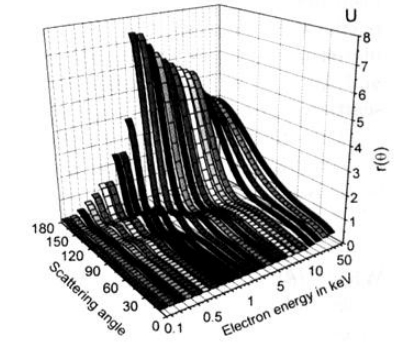
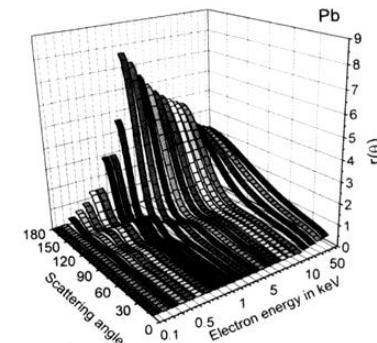
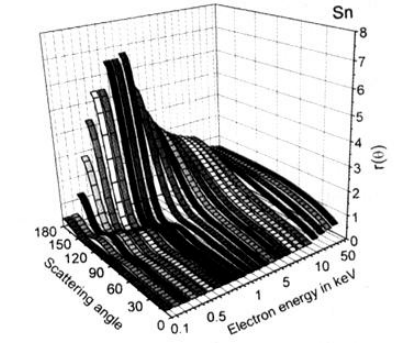
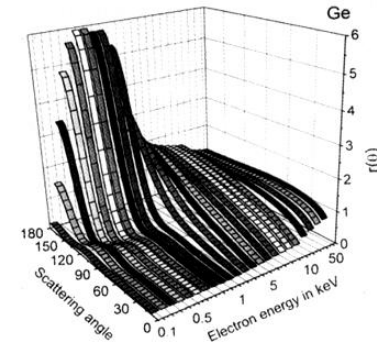
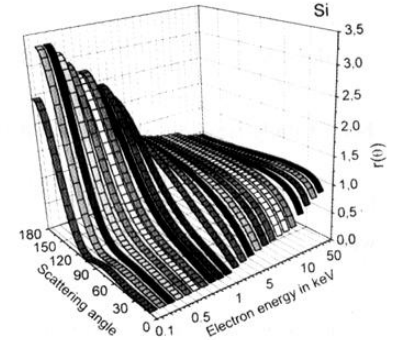
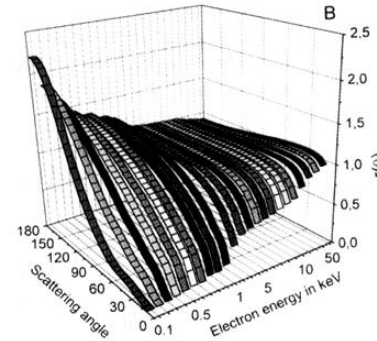
$f(\theta)$ a $g(\theta)$ odpovídají orientaci spinu ve resp. proti směru pohybu; je možné je vyjádřit nekonečnou řadou Legendrových polynomů $P_l^0(\cos\theta)$ a $P_l^1(\cos\theta)$ (tzv. rozklad do parciálních vln)

Pružný rozptyl – porovnání přístupů

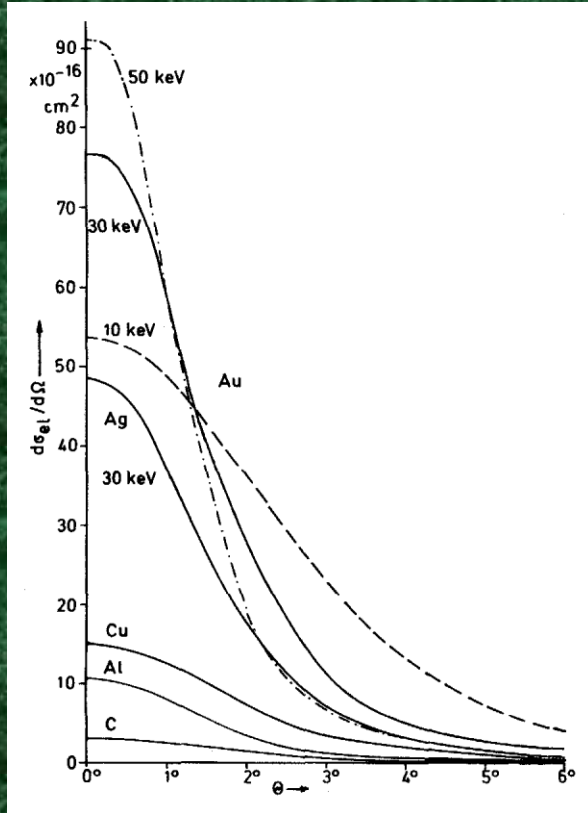


Poměr
 σ_M / σ_{Rn} :

- Pro velmi malé úhly „nestíněný“ Rutherfordův účinný průřez σ_{Rn} diverguje, „stíněný“ průřez vyhovuje.
- Pro velké úhly je nutné použít Mottův účinný průřez σ_M .

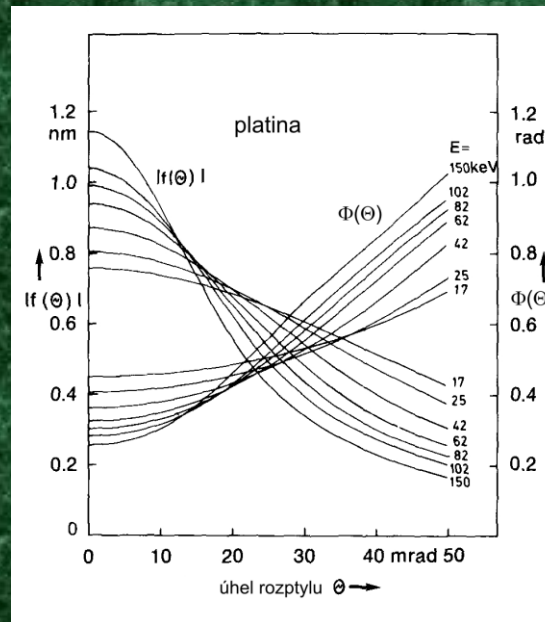
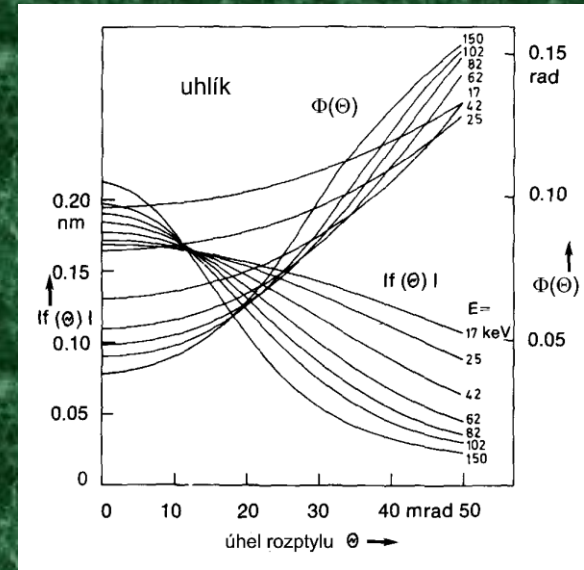


Pružný rozptyl – data



$$V_{\text{Yukawa}}(r) = -g^2 \frac{e^{-k_m r}}{r}$$

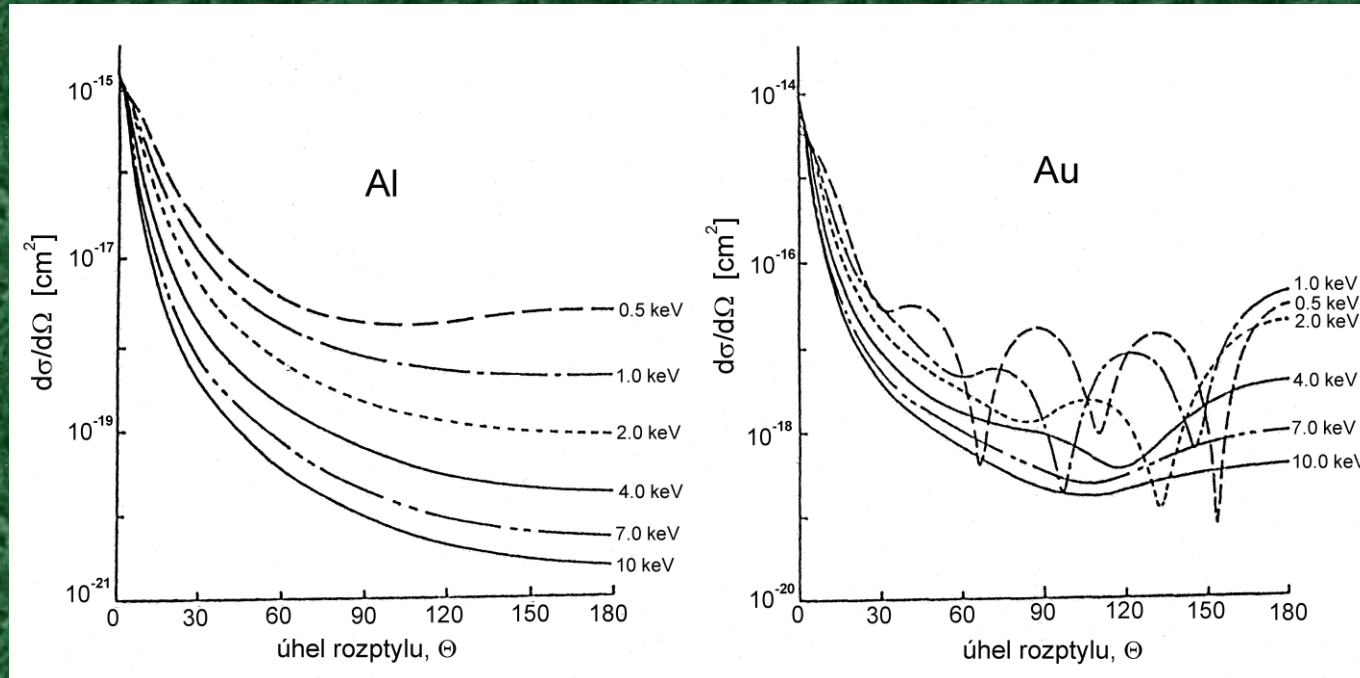
$$f(\theta) = |f(\theta)| \times \exp[i\Phi(\theta)]$$



Wentzelův potenciál +
Bornova aproximace
(tj. „slabý“ fázový objekt) ⇒
reálná amplituda rozptylu $f(\theta)$

- Úplný rozvoj stíněného potenciálu do exponenciálních členů (Yukawův potenciál)
- Překryv atomových potenciálů pomocí modelu muffin-tin

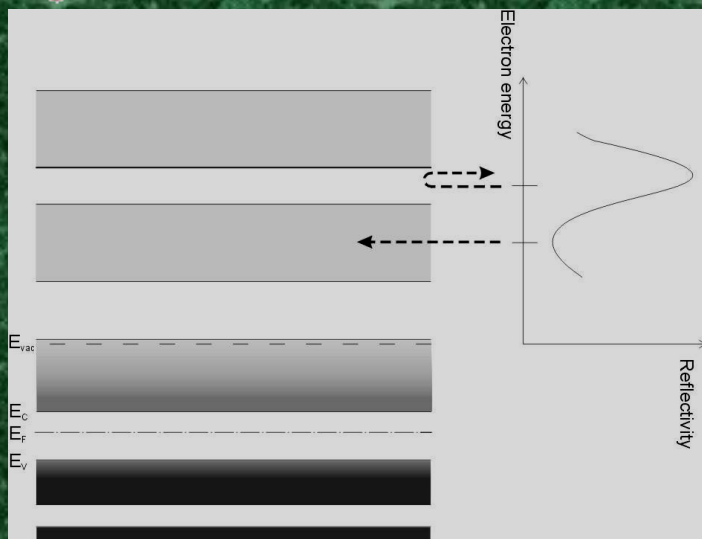
Pružný rozptyl – data



Mottův účinný průřez

Pro nízké energie a těžké prvky se objevují oscilace v úhlovém rozdělení! V oblasti jednotek eV Mottovy průřezy (relativistický rozptyl volných elektronů) nadhodnocují intenzitu rozptylu (střední volná dráha v desetinách nm); je třeba je nahradit rozptylem Blochových elektronů na akustických fononech.

Pružný rozptyl – odraz velmi pomalých elektronů



Dopadá-li elektron s energií pod cca 30 eV a „narazí“ na zakázaný pás, dojde k pružnému odrazu. Odrazivost je tedy nepřímo úměrná lokální hustotě stavů navázaných na dopadající vlnu.

Navázané stavy (coupled states):

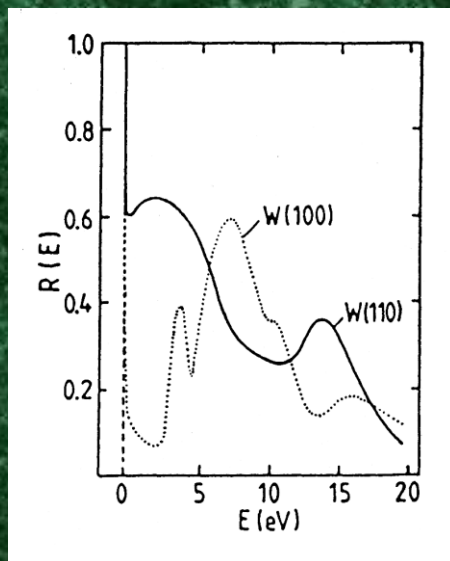
$$\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{K}_{\parallel} + \mathbf{g}$$

\mathbf{k} - Blochův stav ve vzorku

\mathbf{K} - dopadající elektron

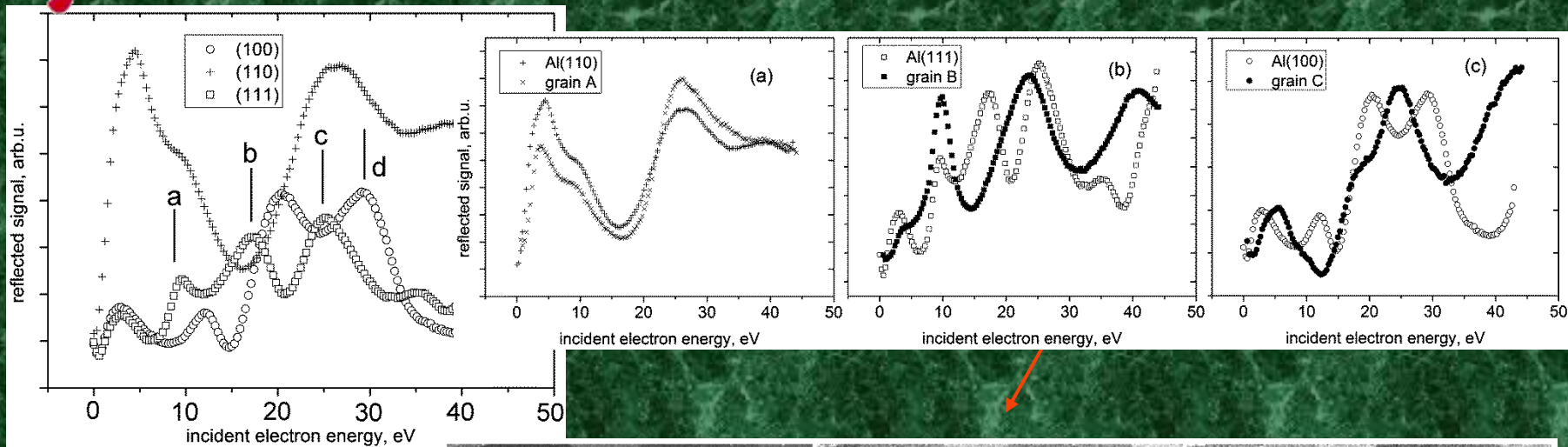
\mathbf{g} – libovolný povrchový vektor reciproké mříže, tedy hlavní Fourierova složka navázaného stavu odpovídá dopadající vlně.

(Viz oblast energiových pásů na I-V křivce stopy (00) LEED obrazce pod energií vyořeni se první nenulové difrakční stopy.)



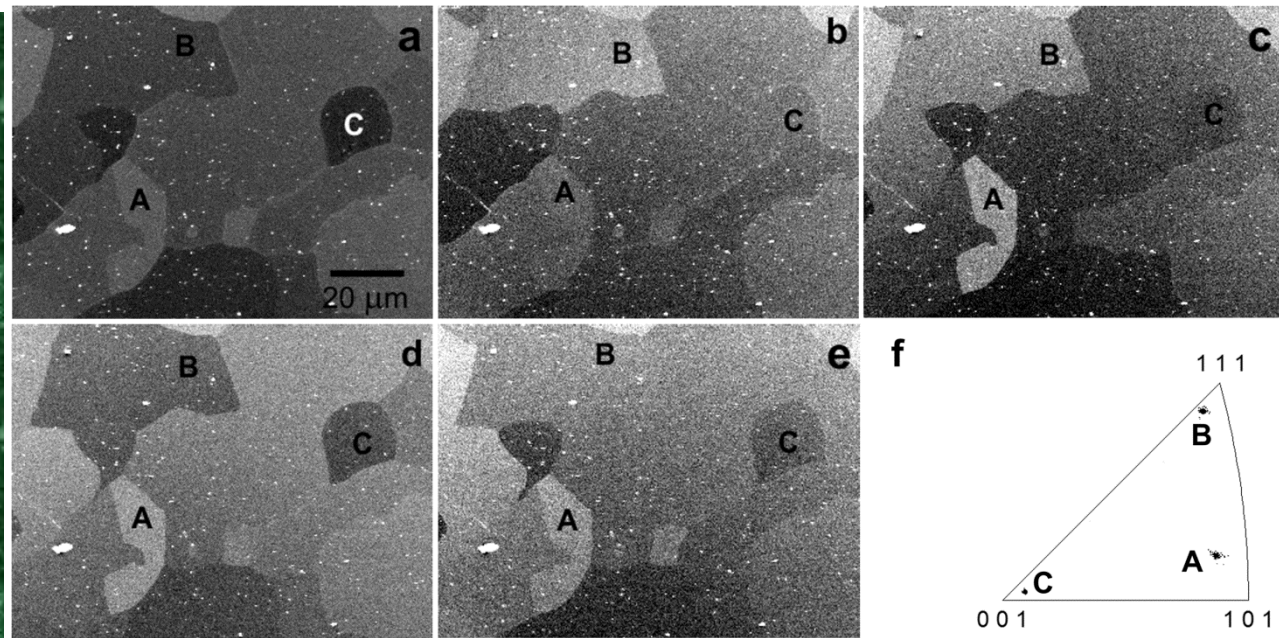
Koeficient pružného odrazu elektronů od různě orientovaných povrchů wolframu

Pružný rozptyl – odraz velmi pomalých elektronů



Atomově čisté monokrystaly a polykrystal Al, odrazivost elektronů

(disertace Z. Pokorná, PŘF MU)



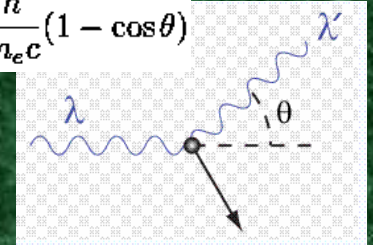
Nep pružný rozptyl – základní typy

- *ionizace vnitřní hladiny atomu*
- *excitace plasmonu, tj. energiového kvanta vln nábojové hustoty valenčních nebo vodivostních elektronů*
- *srážka mezi kvazi-volnými elektrony („Comptonův“ rozptyl)*
- *vybuzení elektronu uvnitř částečně obsazeného pásu*
- *vybuzení mezipásového přechodu*
- *emise kvanta brzdného záření*
- *emise resp. anihilace fononu*

Nepružný rozptyl na elektronech terče

Rozptyl na kvazi-volných elektronech
(„Comptonův“ rozptyl)

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$



V přiblížení nehybného elektronu vzorku je
(E – energie elektronu, W – předaná energie)

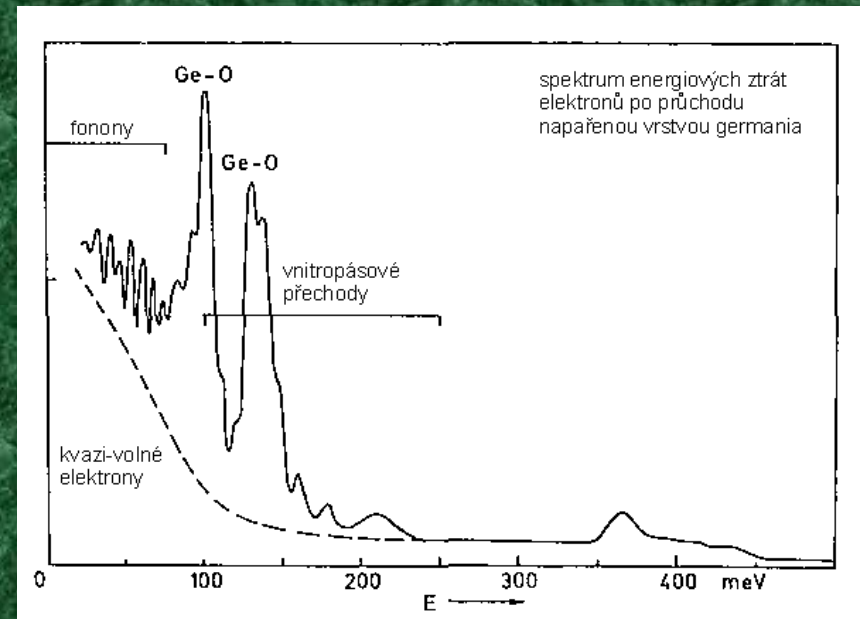
Úhel rozptylu : $\sin^2 \theta = W / E$

$$\frac{d\sigma_{in}}{dW} = \frac{\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{EW^2}$$

Tedy: $W \in (0, E/2)$, $\theta \in (0, \pi/4)$,
jev je pravděpodobnější pro nízké energie, malé změny energie a malý rozptylový úhel, pro $E \rightarrow 0$ přiblížení neplatí.

Po kolizi se elektrony pohybují v navzájem kolmých směrech.

Experiment: jev se projevuje jen v oblasti velmi malých ztrát energie



Nepružný rozptyl na elektronech terče

Ionizace vnitřní hladiny (nejvýznamnější příspěvek k rozptylu)

Atom s jedním elektronem + dopadající elektron \Rightarrow Schrödingerova rovnice pro základní i vybuzené stavy. Příklad: účinný průřez pro ionizaci K-hladiny

$$\sigma_K = \frac{\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{z_K b_K}{E_K^2} \frac{\ln u}{u}$$

($z_K = 2$, $b_K = 0.35$, $u = E/E_K$, maximum σ_K pro $u \approx 3$)

Diferenciální účinný průřez v téže aproximaci:

$$\frac{d\sigma_{in}}{d\Omega} = \frac{e^4 Z}{(4\pi\epsilon_0)^2 E^2} \left[1 - \left(\frac{1}{1 + (\theta^2 + \theta_E^2)/\theta_0^2} \right)^2 \right] \frac{1}{(\theta^2 + \theta_E^2)^2}$$

s charakteristickým úhlem $\theta_E = J/4E$, kde J [eV] $\cong 10Z$ je střední ionizační potenciál.

Poměr diferenciálního i totálního účinného průřezu nepružného rozptylu k pružnému je úměrný $1/Z$!

Nep pružný rozptyl na elektronech terče

Charakteristické úhly rozptylu

Porovnání hodnot θ_0 ze vztahu pro stíněný Rutherfordův průřez a θ_E ve vztahu pro rozptyl ionizací:

$$\theta_0 / \theta_E \cong 1.37 E^{1/2} Z^{-2/3}$$

Pro 1 keV je tento poměr mezi 15 a 1.6 pro $Z = 3$ až 90, pro 100 keV mezi 150 a 15 \Rightarrow relativně malé změny směru trajektorie při nep pružném rozptylu pro lehké prvky a vysoké energie (???)

Publikovaná data:

Střední úhly rozptylů jsou podobné, spíše vyšší pro nep pružný rozptyl

vzorek	keV	$\langle \theta_{cl} \rangle$ deg	$\langle \theta_{in} \rangle$ deg
C	10	2,05	7,16
	40	0,98	1,78
	100	0,63	0,71
Al	10	1,39	4,29
	40	0,68	1,07
	100	0,41	0,43
Au	10	2,38	7,16
	40	1,18	1,78
	100	0,72	0,71

V. Hulínský, K. Jurek:
Zkoumání látek elektronovým
paprskem, SNTL 1982

Nep pružný rozptyl na elektronech terče

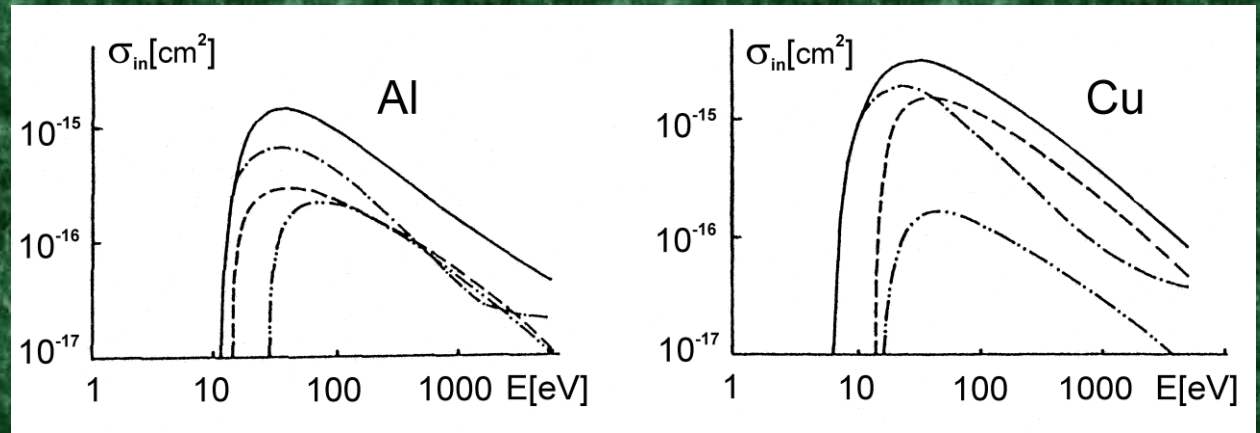
Totální účinný průřez

ionizace

elektron-elektron

excitace plasmonů

totální průřez



Všechny mechanismy rozptylu na elektronech kulminují kolem 50-100 eV a pro nižší energie strmě vymizí. Od nejnižších energií nastupuje napřed rozptyl na kvazivlnných elektronech, pak ionizace a nakonec excitace plasmonů.

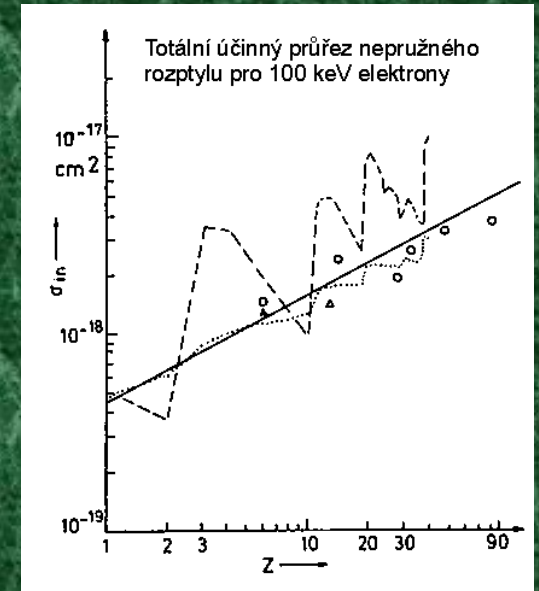
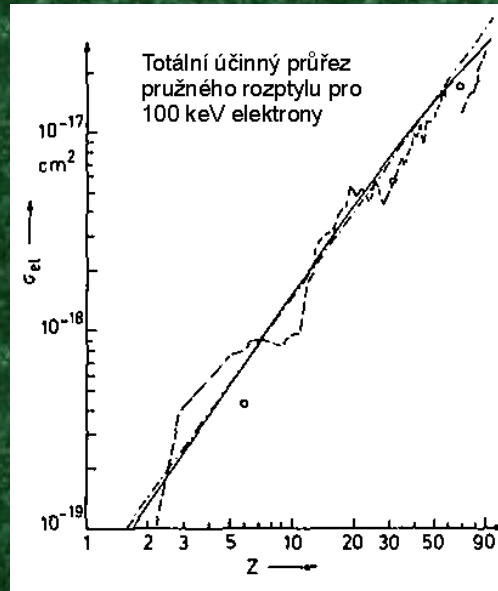
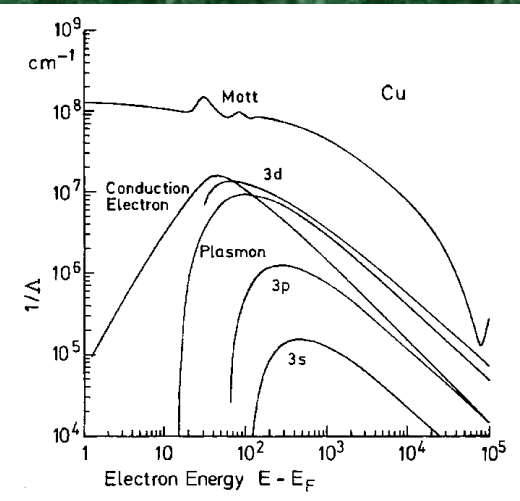
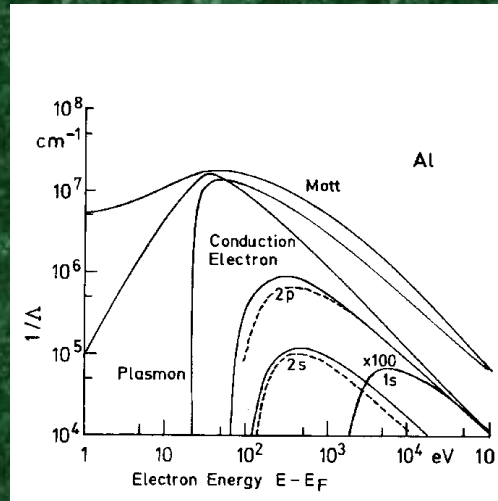
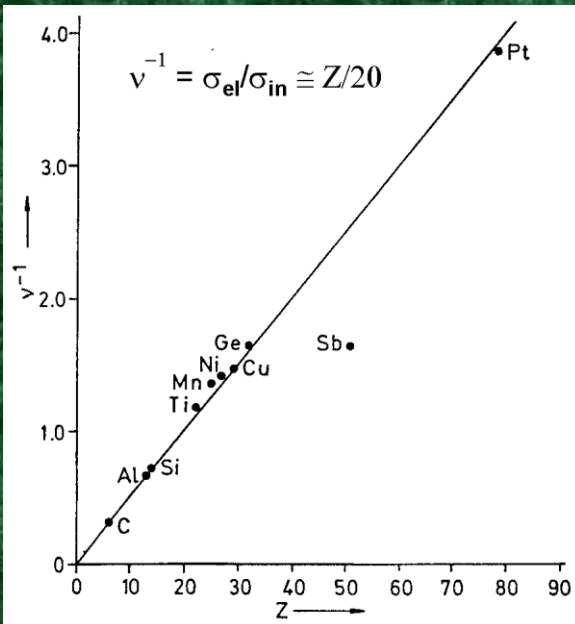
Důsledek: oblast kolem 100 eV vykazuje nejvyšší povrchovou citlivost, nejintenzivnější kontaminaci, největší hustotu poškození.

Porovnání účinných průřezů

$$1/\Lambda = N\sigma$$

(N – počet atomů v jednotkovém objemu)

Experiment:



Nep pružný rozptyl – emise brzdného záření

Při průletu elektronu kolem jádra po zakřivené dráze se časově mění elektrické pole a jsou vyzařovány elektromagnetické vlny – brzdné záření (bremsstrahlung)

Účinnost emise pro tlustý vzorek =

= poměr energie rtg záření k energii el. svazku = kZE

($k \cong 1 \times 10^{-9}$, E – energie elektronu v eV, Z – atomové číslo terče)

SEM: účinnost v řádu 10^{-4}

Poměr mezi energiovými ztrátami (na jednotku dráhy) srážkami s elektrony a brzdným zářením je

$$\frac{S_{rad}}{S_{e-e}} \cong \frac{Z}{160} \frac{E}{511 \text{ keV}}$$

Maximální intenzita v energiovém spektru spojitého záření:

přibližně 2/3 energie elektronů

Nep pružný rozptyl – rozptyl na fononech

Fonony: různé mody elastických kmitů krystalové mříže; charakterizovány disperzní relací $\omega(q)$, tj. závislostí frekvence na vlnovém vektoru.

Je-li v elementární buňce \underline{s} neekvivalentních iontů, má kmitavé spektrum $3 \underline{s}$ větví. Z nich 3 vykazují $\omega \rightarrow 0$ pro $q \rightarrow 0$ (akustické fonony, jeden podélný a dva příčné), zatímco pro zbývajících $3(\underline{s}-1)$ větví je $\omega > 0$ pro $q \rightarrow 0$ (optické fonony, podélné a příčné).

Akustické fonony ~ šíření zvukových vln

Optické fonony ~ kmity atomů v elementární buňce vůči sobě navzájem, v iontových krystalech je to kmitání elektrického dipólu, které může interagovat s elektromagnetickým polem

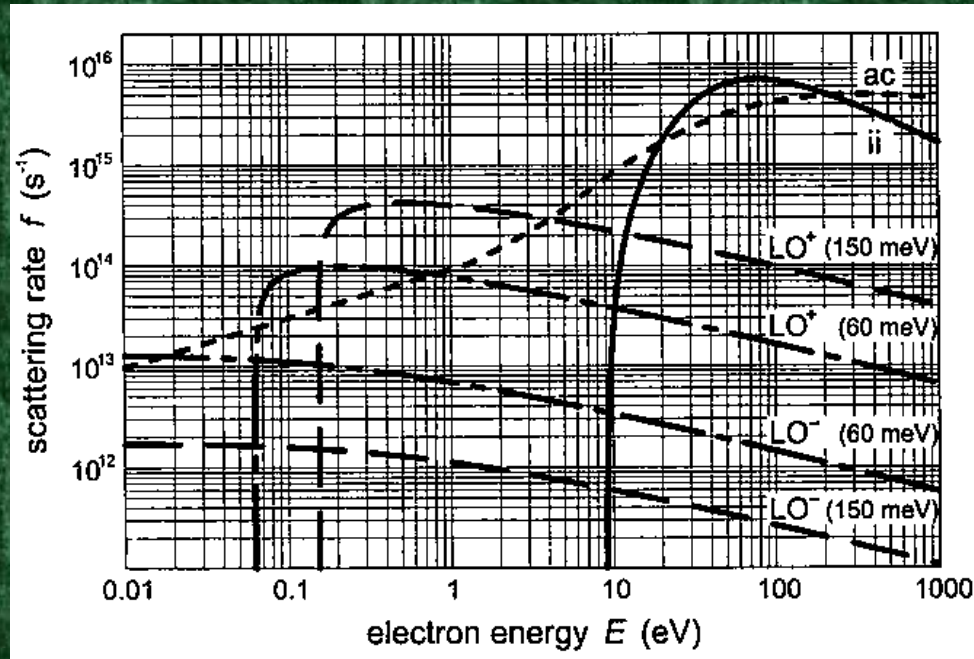
Energie fononů: desítky až stovky meV

Rozptyl elektronů: nejintenzivnější na podélných optických fononech.

Důležité hlavně v izolátorech a polovodičích. Hustota kolizí: maximální při energii rovné trojnásobku energie fononu, cca 10^{14} až 10^{15} s⁻¹.

Nepružný rozptyl – rozptyl na fononech

Příklad: rozptyl na SiO_2



ac – akustické fonony, ii – ionizace, LO^+ - emise fononu, LO^- - anihilace fononu

V oblasti pod 10 eV je rozptyl na fononech převažujícím mechanismem rozptylu !

Nep pružný rozptyl – dielektrická teorie

Dielektrická teorie:

Popisuje pevnou látku komplexní dielektrickou konstantou ε a staví na analogii mezi nep pružným rozptylem elektronů a prostorovým tlumením elektromagnetických vln, úměrným imaginární složce ε . Skupiny elektronů, podobně silně vázané v dané struktuře energiových pásů, jsou považovány za oscilátory definované frekvencí a amplitudou.

Alternativou je formalismus považující dopadající elektron za kvazičástici s energií, jejíž imaginární část udává dobu života kvazičástice a reálná část vyjadřuje změnu hodnot vlastní energie vůči neinteragujícímu systému.

Do třetice: korelační potenciál elektron-jellium, jehož imaginární složka určuje tlumení dielektrické odezvy jellia na dopad elektronu.

Diferenciální účinný průřez:

$$\frac{d^2 \sigma_{in}}{dW d\Omega} = \frac{1}{\pi^2 a_H E N} \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(W, \theta)} \right] \frac{1}{\theta^2 + \theta_D^2}$$

kde $\theta_D = W/2E$.

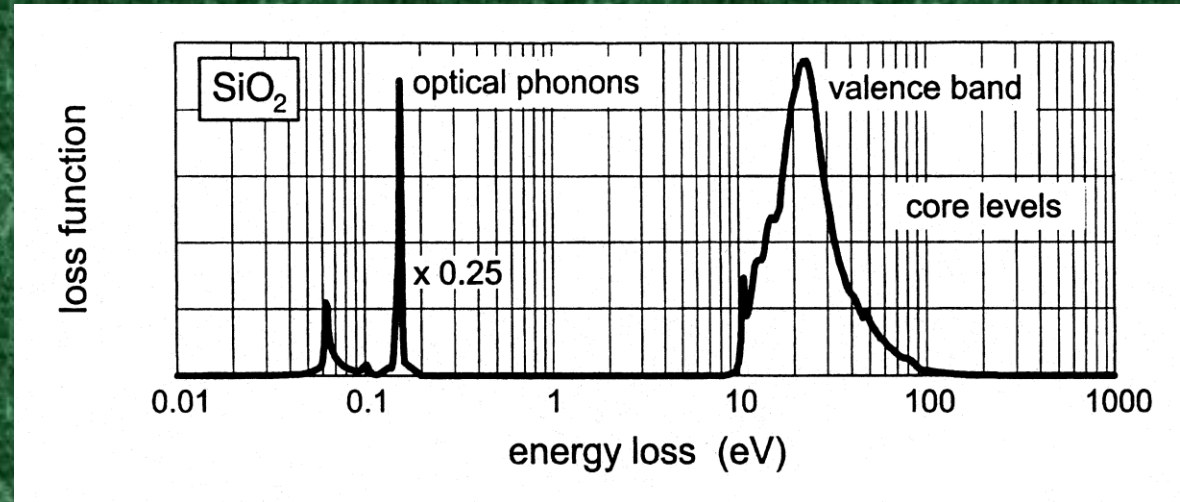
$\varepsilon(W, \theta)$ bývá vyjadřována i v proměnných W, q resp. ω, q (pro $W = h\omega / 2\pi$)

Nep pružný rozptyl – dielektrická teorie

Stanovení $\varepsilon(\omega, q)$:

Ztrátová funkce

$\text{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)]$
z experimentálních
dat EELS pro $q = 0$:



+ disperzní relace

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega(0) + \frac{h}{4\pi m} q^2$$

Ashley-ho model:

$$\text{Im} \left\{ -\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \right\} = \int_0^{\infty} d\omega' \left(\frac{\omega'}{\omega} \right) \text{Im} \left\{ -\frac{1}{\varepsilon(0, \omega')} \right\} \delta \left(\omega - \omega' - \frac{h}{4\pi m} q^2 \right)$$

Mnohonásobný rozptyl – statistika

Základní pojmy:

Střední volná dráha λ_t – průměrná vzdálenost mezi dvěma rozptylovými událostmi

Pružná (nepružná) střední volná dráha λ_e (λ_i) – průměrná vzdálenost mezi dvěma pružnými (nepružnými) kolizemi

Brzdná síla S [eV Å⁻¹] - průměrná ztráta energie na jednotku délky trajektorie

Elektronový dolet R – celková délka trajektorie elektronu ve vzorku (několik variant podle způsobu stanovování)

Další charakteristiky:

- úhlové rozdělení elektronů prošlých vrstvou*
- příčné rozšíření svazku po průchodu vrstvou*
- rozdělení energiových ztrát po průchodu vrstvou*
- hloubkové rozdělení energie rozptýlené ve vzorku*
- ohřátí a poškození vzorku*

Mnohonásobný rozptyl – statistika

Totální účinný průřez:

$$\sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_{in} = 2\pi \int_0^\pi \left(\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{in}}{d\Omega} \right) \sin\theta d\theta$$

Střední volná dráha:

$$\lambda_t = \frac{1}{N\sigma_t}, \quad \lambda_{el} = \frac{1}{N\sigma_{el}}, \quad \lambda_{in} = \frac{1}{N\sigma_{in}}, \quad N = \frac{N_A \rho}{A}$$

(N_A – Avogadrovo číslo, A – atomové číslo, ρ - hustota)

Brzdná síla (Bethe, Reimer):

$$S = \frac{2\pi e^4 \rho Z}{(4\pi\epsilon_0)^2 E} \frac{N_A}{A} \ln\left(1.166 \frac{E}{J}\right)$$

Střední ionizační potenciál:

$J = 9,76 Z + 58,8 Z^{-0,19}$, $J = 11,5 Z$ (pro $Z \leq 6$) (Berger a Seltzer)

$J \rightarrow J' = J/(1+kJ/E)$ s $k \approx 0,8$ pro $E \leq 1$ keV (Joy)

$S \sim E^{1/2}$ pro $E \leq 1$ keV (Rao-Sahib a Wittry) ???

$S \sim E^{5/2}$ pro $E \leq 100$ eV (Tung) !!!

Mnohonásobný rozptyl – statistika

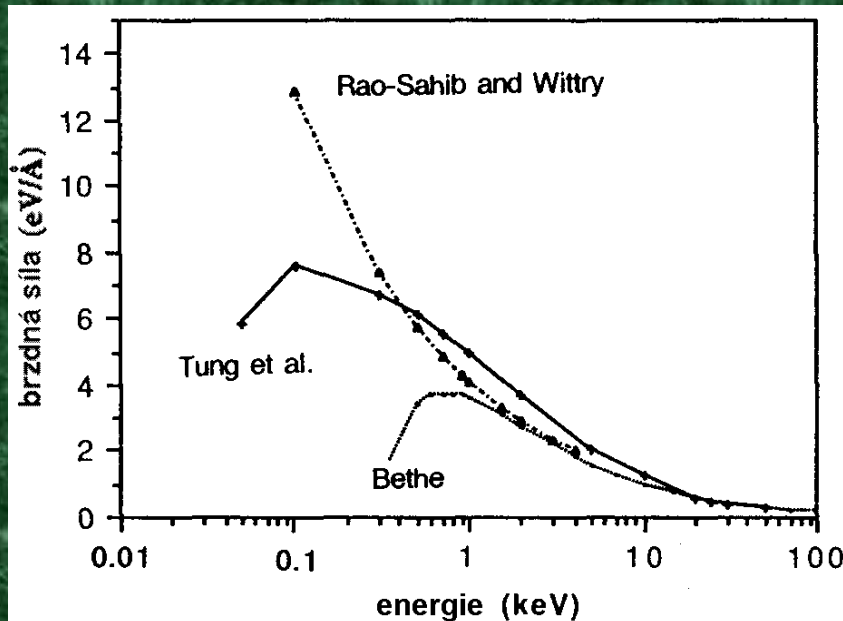
Brzdná síla (Joy a Luo):
(pro čisté prvky)

$$S = -7850 \frac{\rho Z}{A E} \sum_i \frac{Z_i}{Z} \ln \frac{E}{E_i} \quad [\text{eV/nm}]$$

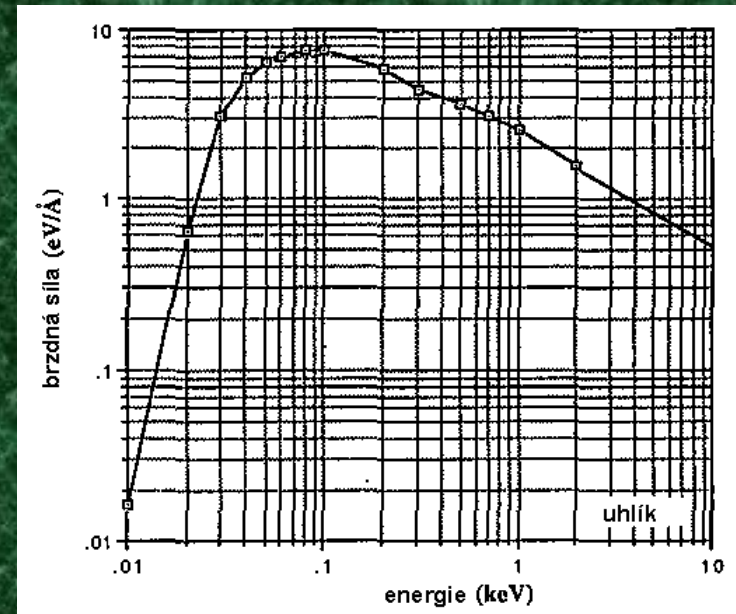
(Z_i – obsazení hladiny i , E_i – vazebná energie hladiny, ρ v g cm^{-3})

Data:

Brzdná síla



Výpočet pro Cu

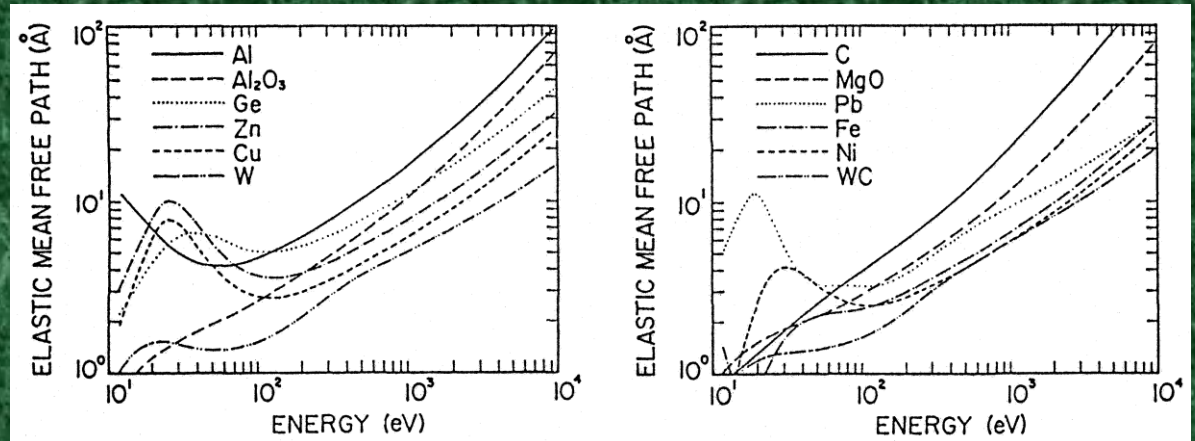


Experiment

Mnohonásobný rozptyl – statistika

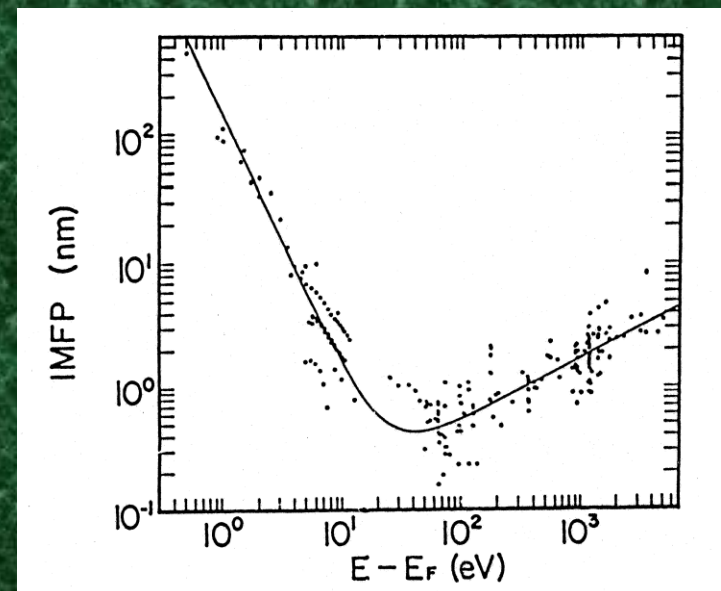
*Pružná střední volná dráha
(výpočet, Ding 1990):*

Mottovy účinné průřezy, nemonotonní chování při velmi nízkých energiích



*Nepružná střední volná dráha
(sebraná experimentální data pro různé prvky a sloučeniny, Seah a Dench 1979):*

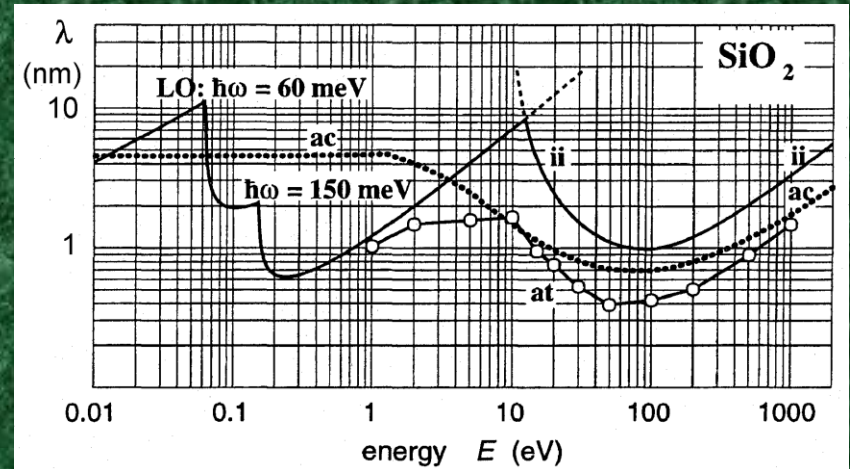
Přibližně lze proložit univerzální křivku !!



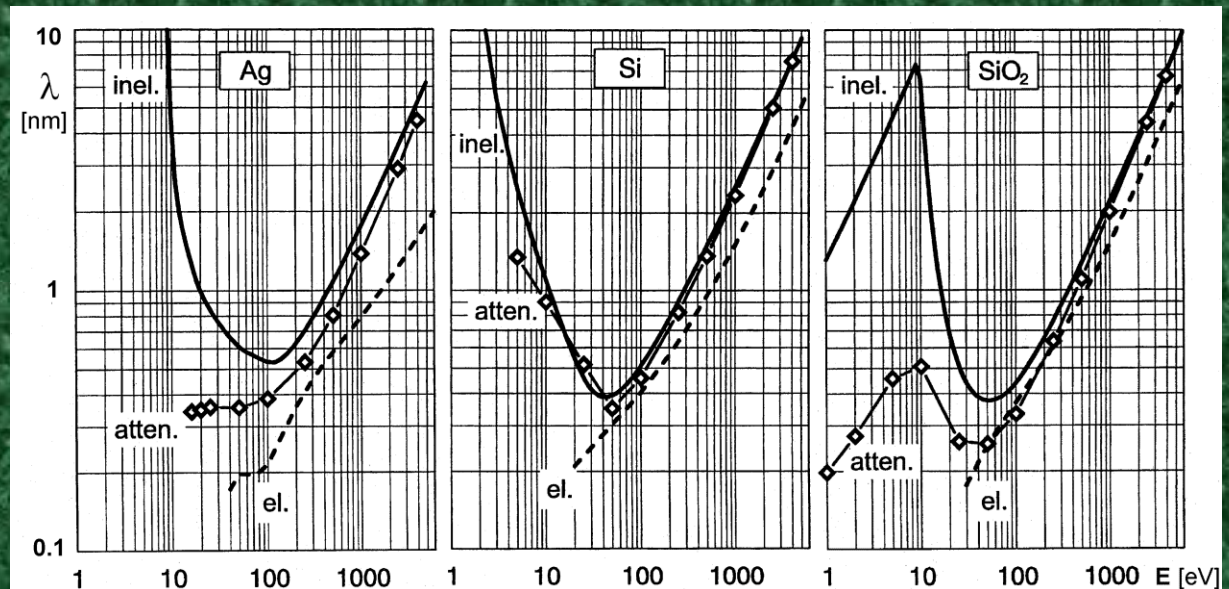
Mnohonásobný rozptyl – statistika

*Nepružná střední volná dráha
(výpočet, Schreiber a Fitting 2002):*

*ii – ionizace, ac – rozptyl na akustických
resp. LO – na optických fononech,
at – hloubka úniku elektronu (bez ztráty
energie)*

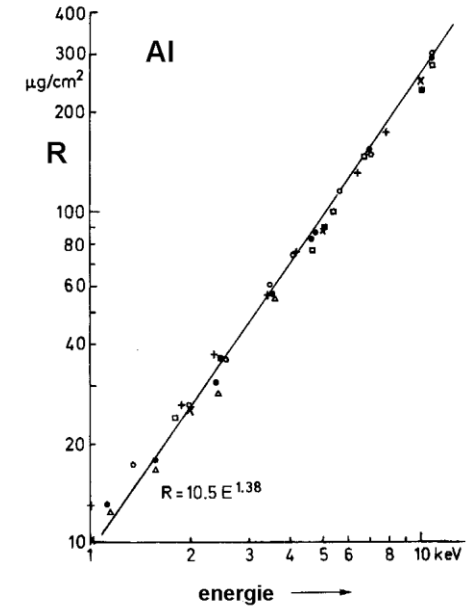
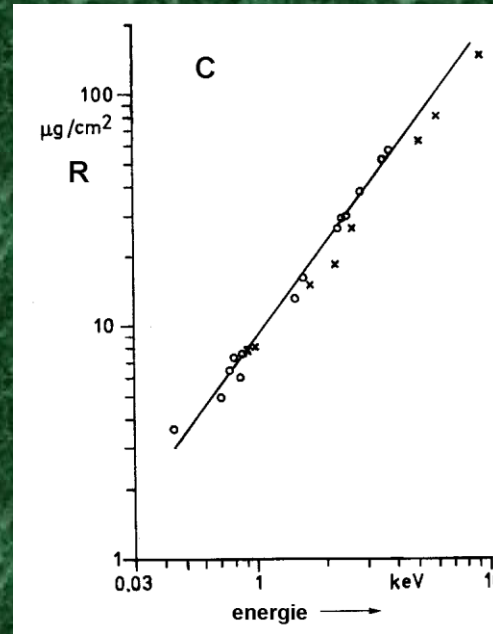
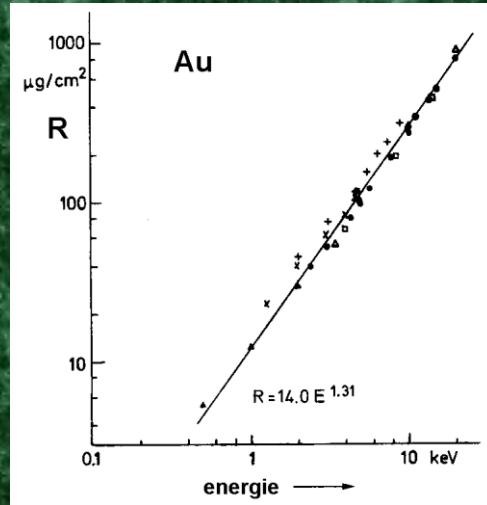


*Porovnání středních
volných drah a hloubky
úniku (výpočet, Fitting
et al. 2001):*



Mnohonásobný rozptyl – statistika

Elektronový dolet:
(experiment)



$R \cong a E^n$ [$\mu\text{g cm}^{-2}$, keV], $a \approx 10$, $n \approx 1,3 \div 1,7$
(dolní hodnota pro nižší energie)

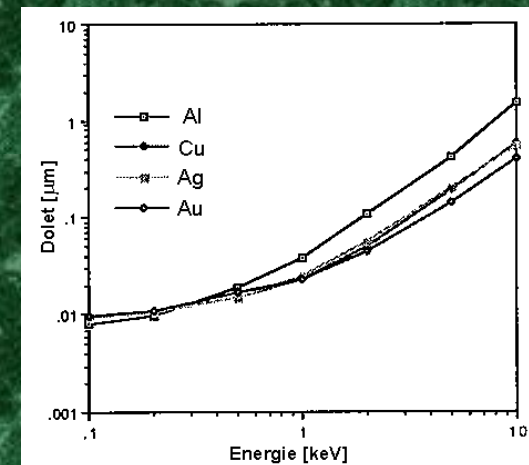
$10 \mu\text{g cm}^{-2} \sim$

45 nm pro C

37 nm pro Al

5 nm pro Au

Joy, výpočet numerickou
integrací brzdě síly



Mnohonásobný rozptyl – statistika

Pronikání elektronů pevnou látkou:

Pokles počtu nerozptýlených elektronů ve vrstvě dz : $dI/I = -\sigma_t N dz$

Nerozptýlený tok po průchodu tloušťkou t : $I = I_0 \exp(-t/\lambda)$

Střední počet srážek ve vrstvě : $p = t/\lambda$

Pravděpodobnost p_n srážek pro 1 elektron ve vrstvě : $P_n = p^n e^{-p} / n!$

Funguje do $p \approx 25$ srážek, tj. délka trajektorie v řádu 10^1 nm. Pro delší úseky trajektorie je třeba použít aparát difuze elektronů (transportní rovnice, simulace algoritmem Monte Carlo).

Rozšiřování průřezu svazku: pro malé energiové ztráty a malé úhly rozptylu je úměrné $t^{3/2}$:

$$r_{rms} = 1,05 \times 10^5 \left(\frac{\rho}{A} \right)^{1/2} \frac{Z}{E} t^{3/2}$$

($r, t \sim \text{cm}$, $\rho \sim \text{g cm}^{-3}$, $E \sim \text{eV}$)

Pro $t = 200 \text{ nm}$ a $E = 100 \text{ keV}$ je $r = 10 \text{ nm}$ v Cu a 23 nm v Au.

Mnohonásobný rozptyl – statistika

Úhlové rozdělení svazku: zanedbáme-li energiové ztráty a rozptyl pod velkými úhly, je $N(\theta) \sim \exp(-\theta^2 / \langle \theta^2 \rangle)$, kde střední úhel je

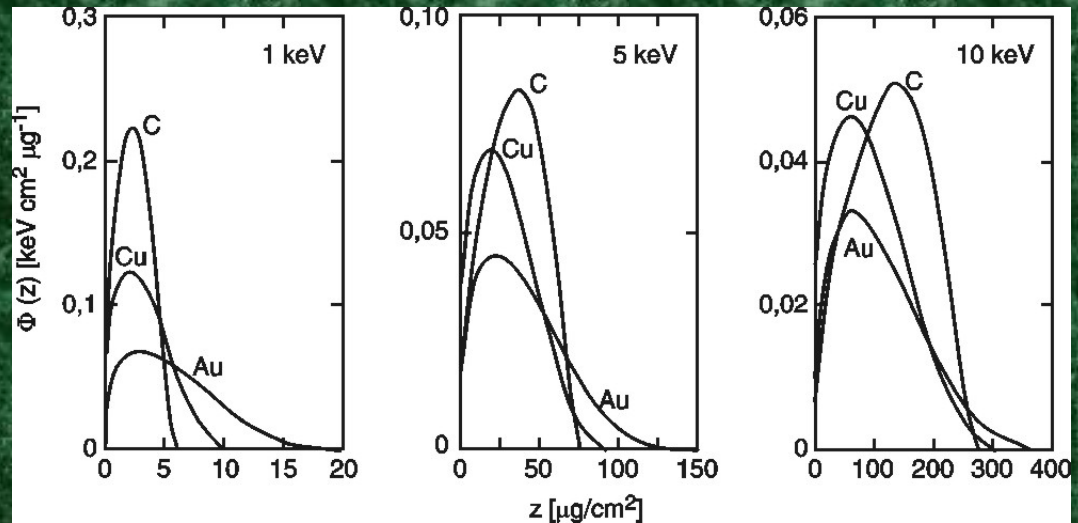
$$\langle \theta^2 \rangle = 1,2 \times 10^7 \frac{\rho}{AE} Z^{3/2} t$$

($\theta \sim \text{rad}$, $t \sim \text{cm}$, $\rho \sim \text{g cm}^{-3}$, $E \sim \text{eV}$).

Např. pro Al při 1 keV je $\langle \theta^2 \rangle = 5,6 \text{ mrad} \times t [\text{nm}]$

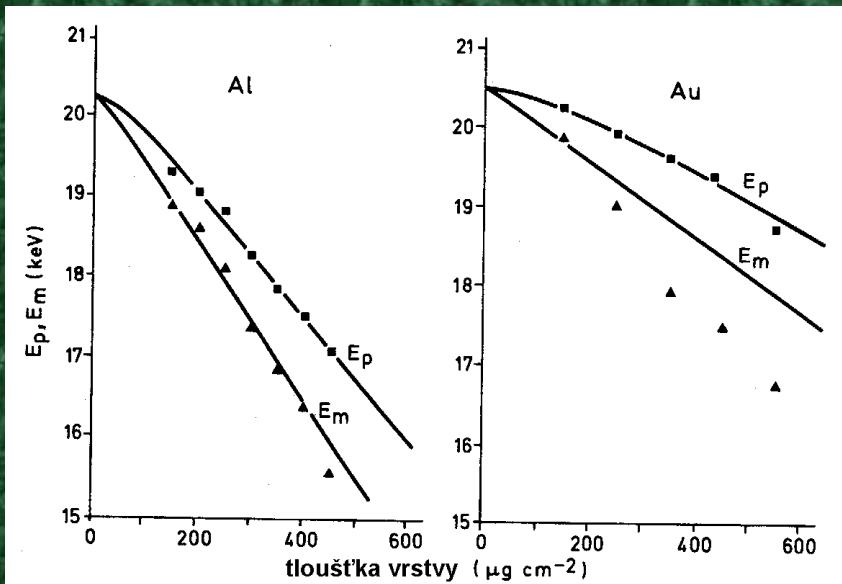
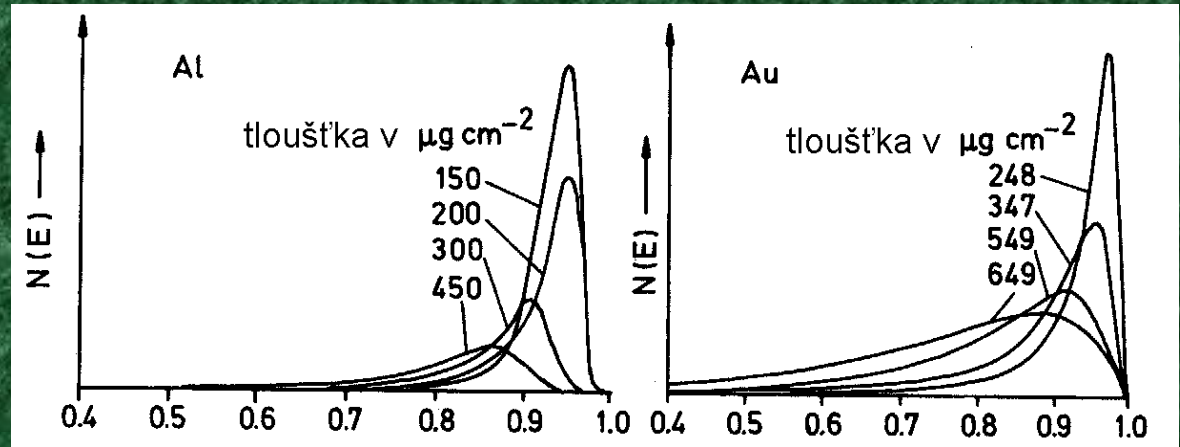
Hloubkové rozdělení energie rozptýlené ve vzorku:

Výpočet hloubkového rozdělení ionizační energie za použití Mottových průřezů (Reimer a Senkel 1995)



Mnohonásobný rozptyl – statistika

Rozdělení energií elektronů po průchodu vrstvou:



E_p – nejpravděpodobnější energie
 E_m – střední energie
 (výpočet + experiment)

$100 \mu\text{g cm}^{-2} \sim 370 \text{ nm pro Al}$
 50 nm pro Au

Mnohonásobný rozptyl – statistika

$$v = \sigma_{in} / \sigma_{el}$$

E [keV]		1	5	10	20	30	50	
C $Z = 6$ $\rho = 2 \text{ gcm}^{-3}$ $v \approx 3$	σ_{el}	0,65	0,11	0,055	0,027	0,018	0,012	$\times 10^{-16} \text{ cm}^2$
	λ_{el}	1,5	9	18	37	55	83	nm
	λ_t	0,4	2,3	4,5	9	14	20	nm
	R	0,033	0,49	1,55	4,9	9,7	22,6	μm
Al $Z = 13$ $\rho = 2,7 \text{ gcm}^{-3}$ $v \approx 1,5$	σ_{el}	1,26	0,31	0,16	0,08	0,053	0,034	$\times 10^{-16} \text{ cm}^2$
	λ_{el}	1,3	5	10	21	31	49	nm
	λ_t	0,5	2	4	8	12	20	nm
	R	0,025	0,36	1,14	3,6	7,1	16,7	μm
Cu $Z = 29$ $\rho = 8,9 \text{ gcm}^{-3}$ $v \approx 0,6$	σ_{el}	1,84	0,64	0,37	0,21	0,15	0,11	$\times 10^{-16} \text{ cm}^2$
	λ_{el}	0,64	1,8	3,2	5,6	7,8	10,7	nm
	λ_t	0,4	1,1	2,0	3,5	4,9	6,7	nm
	R	0,007	0,11	0,35	1,10	2,26	5,1	μm
Ag $Z = 47$ $\rho = 10,5 \text{ gcm}^{-3}$ $v \approx 0,4$	σ_{el}	3,09	1,15	0,71	0,43	0,32	0,22	$\times 10^{-16} \text{ cm}^2$
	λ_{el}	0,5	1,5	2,4	4,0	5,3	7,7	nm
	λ_t	0,4	1,0	1,7	2,8	3,8	5,5	nm
	R	0,006	0,09	0,29	0,93	1,8	4,3	μm
Au $Z = 79$ $\rho = 19,3 \text{ gcm}^{-3}$ $v \approx 0,2$	σ_{el}	3,93	1,60	1,05	0,67	0,52	0,37	$\times 10^{-16} \text{ cm}^2$
	λ_{el}	0,43	1,0	1,6	2,5	3,3	4,6	nm
	λ_t	0,36	0,9	1,3	2,1	2,7	3,8	nm
	R	0,003	0,05	0,17	0,51	1,0	2,3	μm

Zahřívání a poškozování vzorku

Pro stacionární svazek a polokulový interakční objem o poloměru R v objemném materiálu je ohřátí osvětleného bodu

$$\Delta T_{obj} = \frac{3dUI}{2\pi cR} \quad (d - \text{podíl absorbovaného proudu svazku, } U \text{ a } I - \text{urychlovací napětí a proud svazku, } c \text{ v } \text{Js}^{-1}\text{m}^{-1}\text{K}^{-1} \text{ je tepelná vodivost)}$$

Příklad: Cu, 20 keV, 1 nA, $d = 0.7 \Rightarrow \Delta T = 0,02^\circ\text{C}$

Polymery - tepelná vodivost o cca 2 řády nižší, tj. ΔT v jednotkách stupňů

Poměr U/R a tedy i ohřátí roste při snižování energie elektronů !

(Růst emise SE do cca 2 keV \Rightarrow stačí nižší primární proud \Rightarrow menší ohřev)

Ostrůvek vrstvy s nízkou tepelnou vodivostí na kovu:

$$\Delta T_{ost} = \frac{d jU}{c} (l - R/4)$$

($j = I/S_A$ je proudová hustota, S_A - plocha ostrůvku, $l \geq R/2$ je tloušťka vrstvy)

Je-li ostrůvek menší než zorné pole, pak ΔT s energií elektronů klesá, jinak může opět růst.

Zahřívání a poškození vzorku

Vlákno osvětlené na jednom konci; rozdíl teploty mezi oběma konci:

$$\Delta T_{vl} = \frac{4dUI}{\pi c} \frac{L}{D^2}, \quad \frac{\Delta T_{vl}}{\Delta T_{obj}} = \frac{8}{3} \frac{LR}{D^2}$$

(L – délka vlákna, D – průměr vlákna).

Intenzivní ohřátí u dlouhých tenkých vláken !

Vliv pokovení: pouze když součin průřezu a tepelné vodivosti je pro kovovou vrstvu vyšší než pro málo vodivé vlákno nebo vrstvu

Radiační poškození: (nejčastěji ionizační jevy)

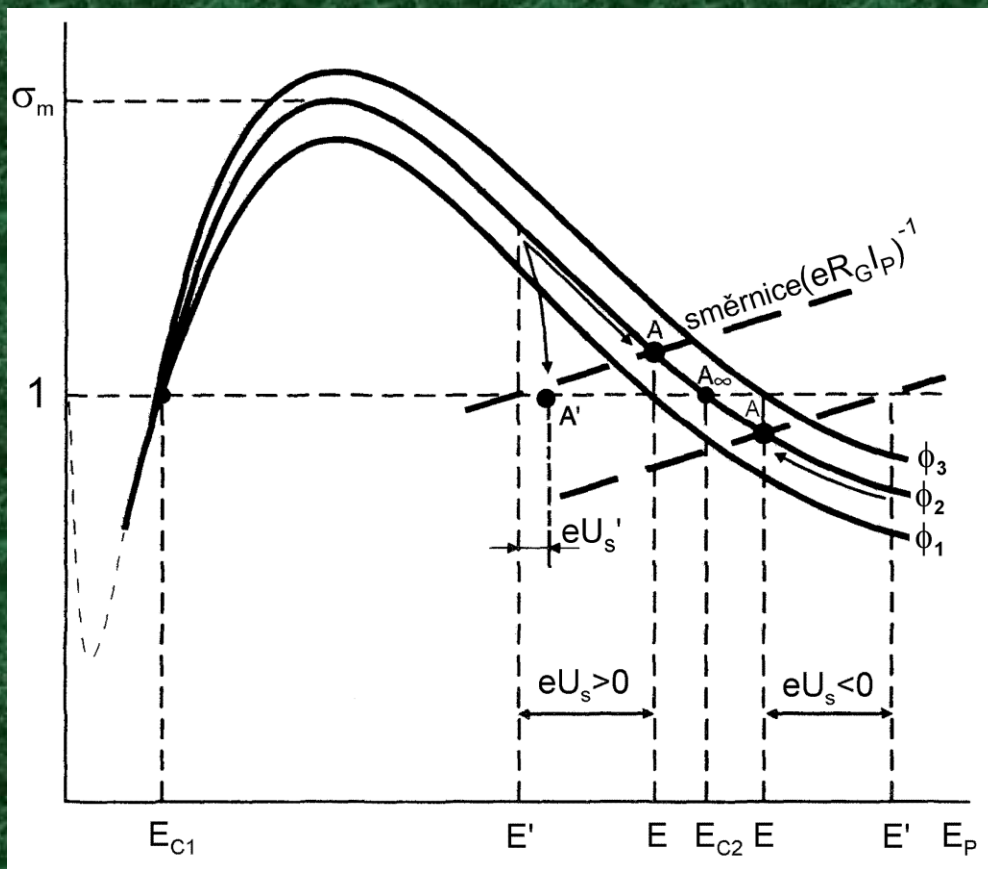
Z brzdné síly : $S \sim E^{-0,8}$

Z objemové hustoty energie: dodaná energie $\sim E$, hloubka průniku $\sim E^{4/3}$,
hustota $\sim E^{-1/3}$ (odvod prostřednictvím BSE se málo mění)

Z účinných průřezů: $\sim E^{-1}$

Radiační poškození při nízkých energiích vesměs roste ! (Např. rozklad uhlovodíků a tvorba kontaminační uhlíkové vrstvy.)

Nabíjení vzorku



$E > E_{C2}$:

$\sigma < 1$, záporný povrchový náboj a potenciál, posuv „pracovního bodu“ do A pro konečnou vodivost resp. do A_∞ pro nulovou vodivost

$E < E_{C2}$:

$\sigma > 1$, kladný povrchový náboj a potenciál
Pracovní bod A' : nabitý povrch přitahuje zpět SE

$E < E_{C1}$:

metastabilní, spontánně buď zrcadlový obraz nebo $\rightarrow A'$

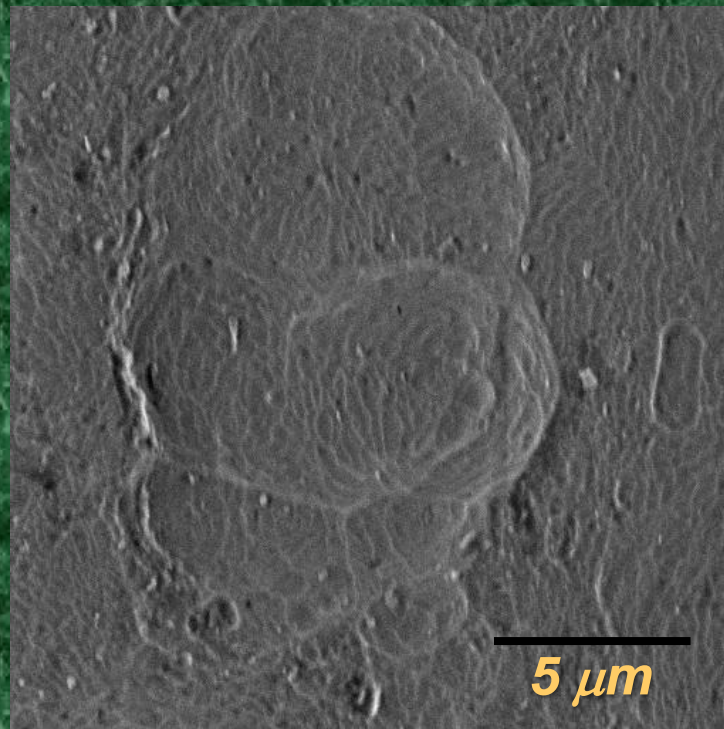
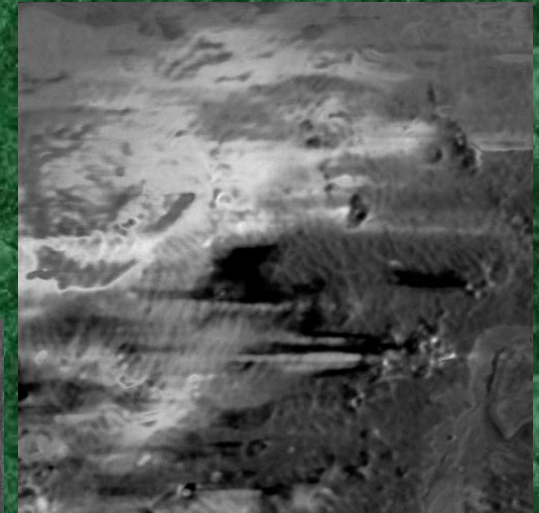
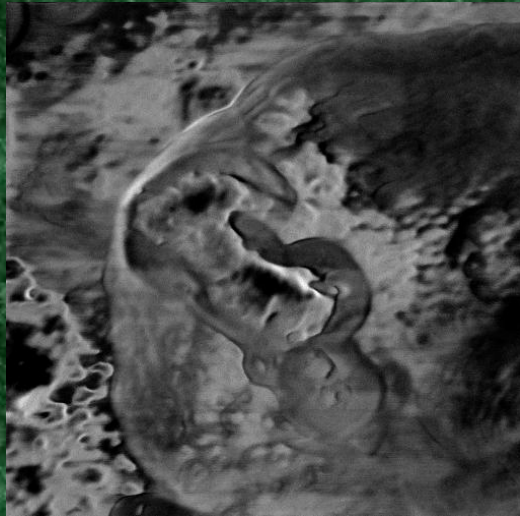
V oblasti mezi E_{C1} a E_{C2} redukované nabíjení, optimum pro $E = E_{C2}$

Nabíjení vzorku

2800 eV

3200 eV

3000 eV



*Při kritické energii
získáme obraz s
nízkým kontrastem,
ale nezatížený
nabíjecími artefakty*

*Povrch hliníku
pokrytý
11 μm Al₂O₃*

5 μm

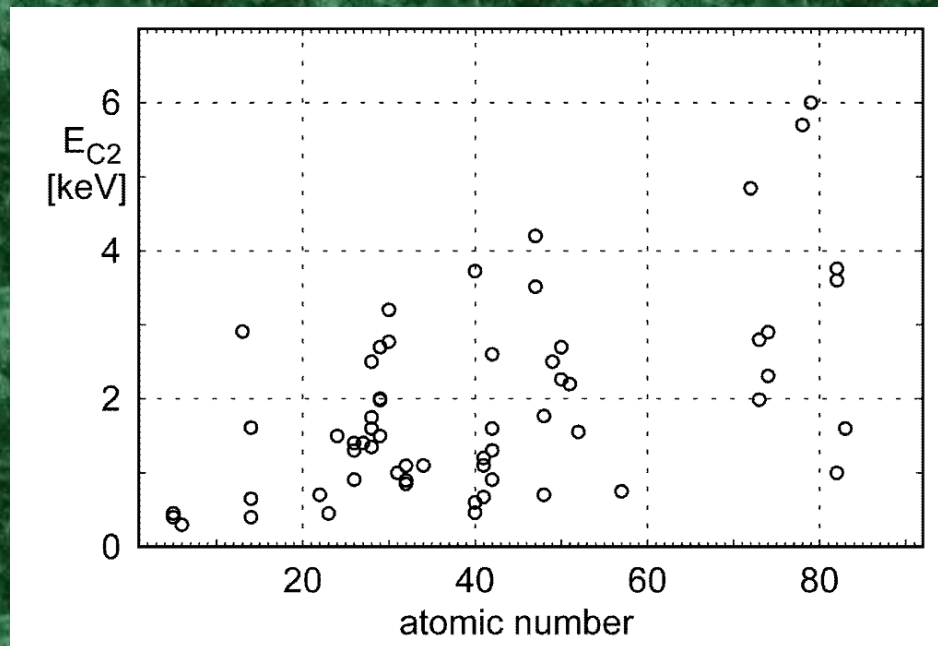
Nabíjení vzorku

Jednoduchý model nabíjení tenké desky na povrchu vzorku,
časová konstanta nabíjení ovlivňujícího obraz:

(ε - permitivita vzorku, a – průměr zorného pole,
 I_P – primární proud, η - výtěžek BSE)

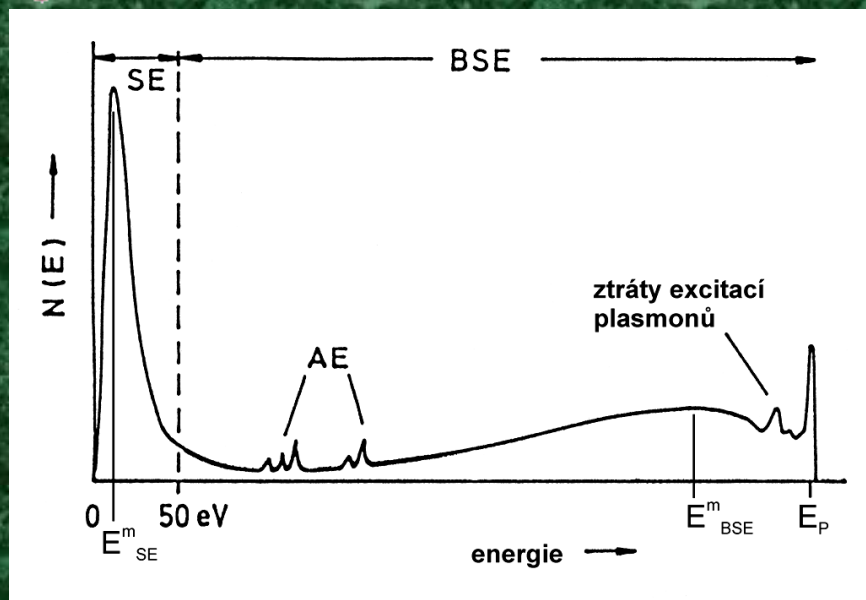
$$\tau_C \cong 2.5 \frac{\varepsilon a E_{C2}}{e I_P (1-\eta)}$$

Příklad: SiO_2 , $1 \text{ nA} \Rightarrow \tau_C$ mezi $200 \mu\text{s}$ a 20 ms pro a mezi 1 a $100 \mu\text{m}$



Naměřené hodnoty pro
vodivé chemické prvky

Emise elektronů



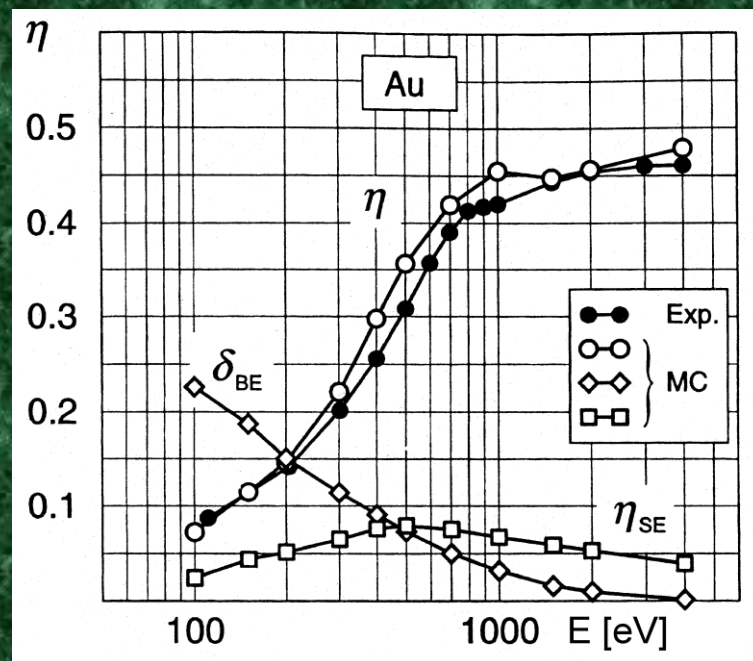
Základní signály : sekundární (SE) a zpětně odražené (BSE) elektrony.

„Smluvní“ rozhraní : 50 eV

Vzájemná kompenzace přesahů neúplná: pod 400 eV pomalé BSE (δ_{BE}) převyšují rychlé SE (η_{SE}), nad 400 eV naopak.

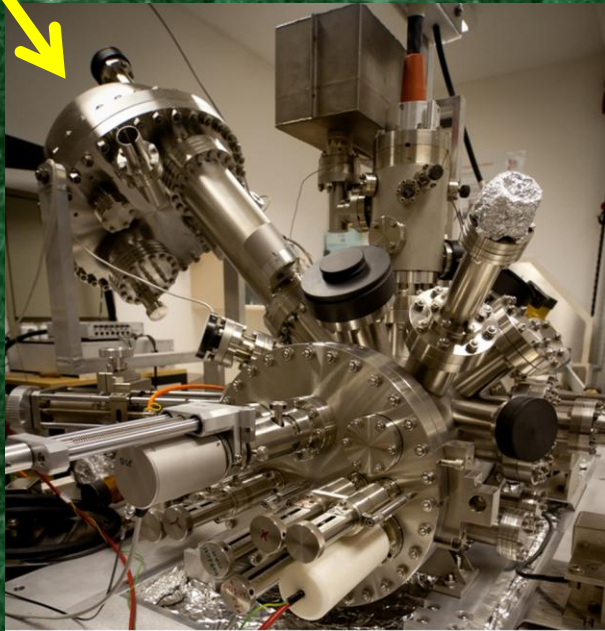
AE – Augerovy elektrony s definovanou energií, komplementární jev k emisi charakteristického rtg záření

Plasmonové ztráty – důležité pro režim EELS v TEM

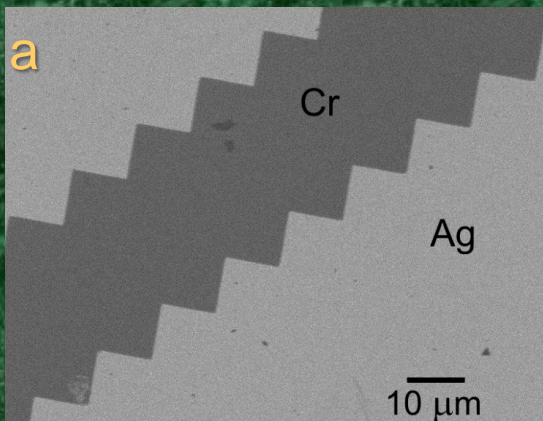
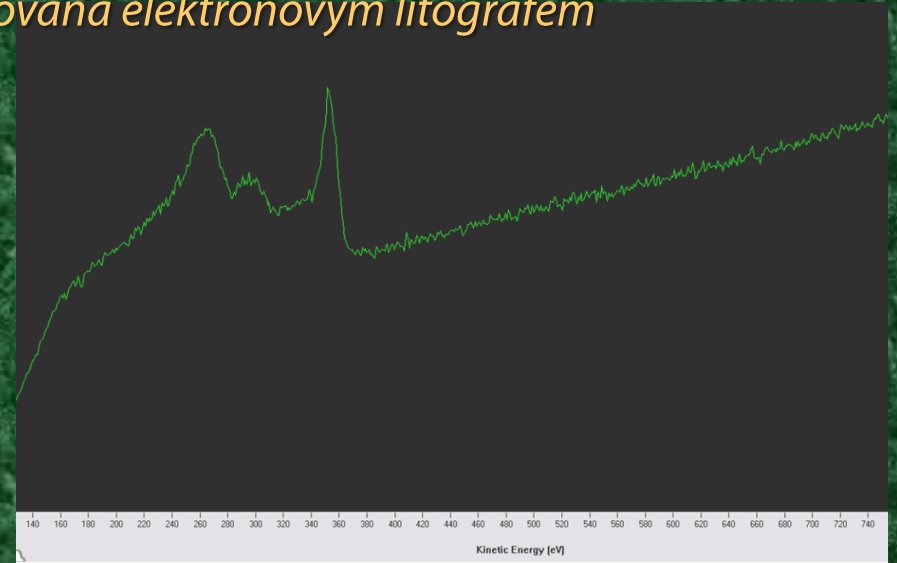


Augerovy elektrony

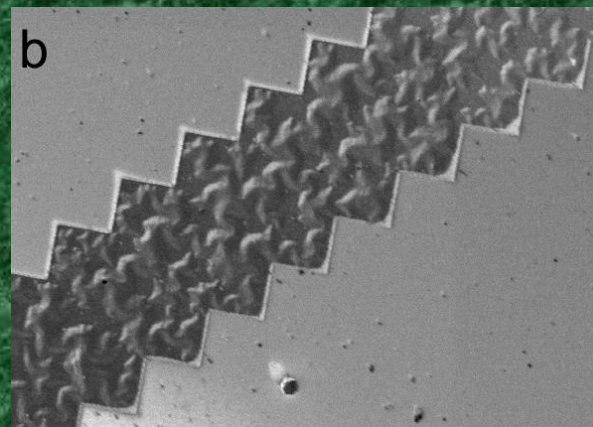
100 nm vrstva Cr na stříbrem pokrytém křemíku,
tvarovaná elektronovým litografem



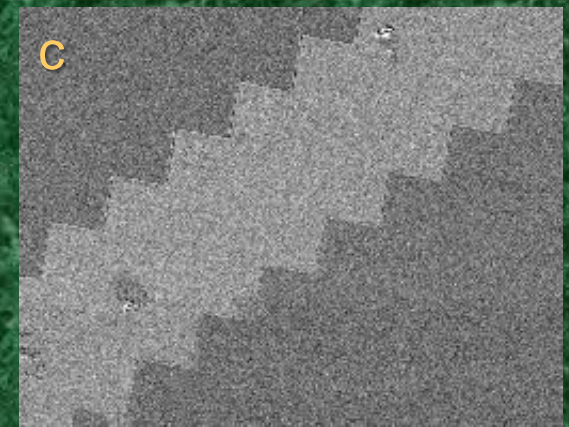
spektrum
Cr



BSE, 6 keV



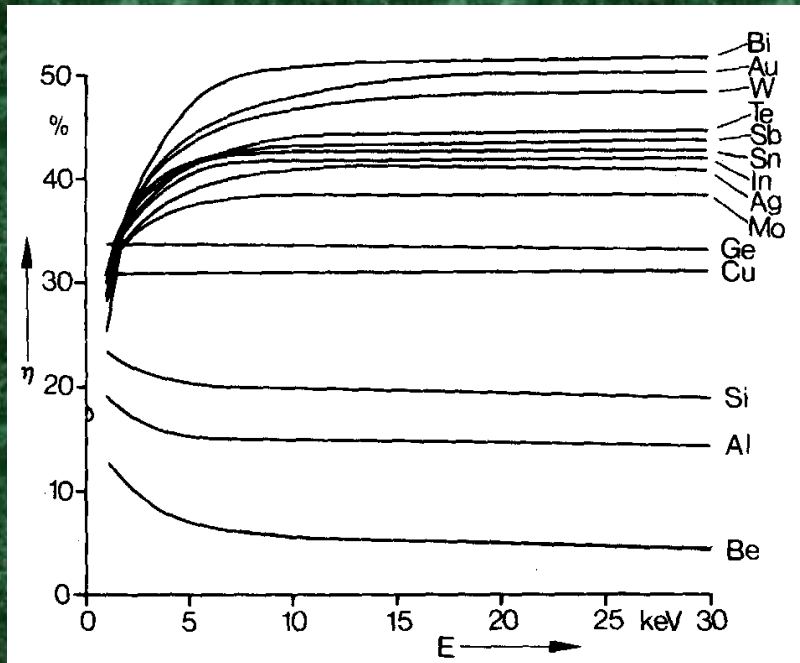
BSE, 1 keV



mapa Cr

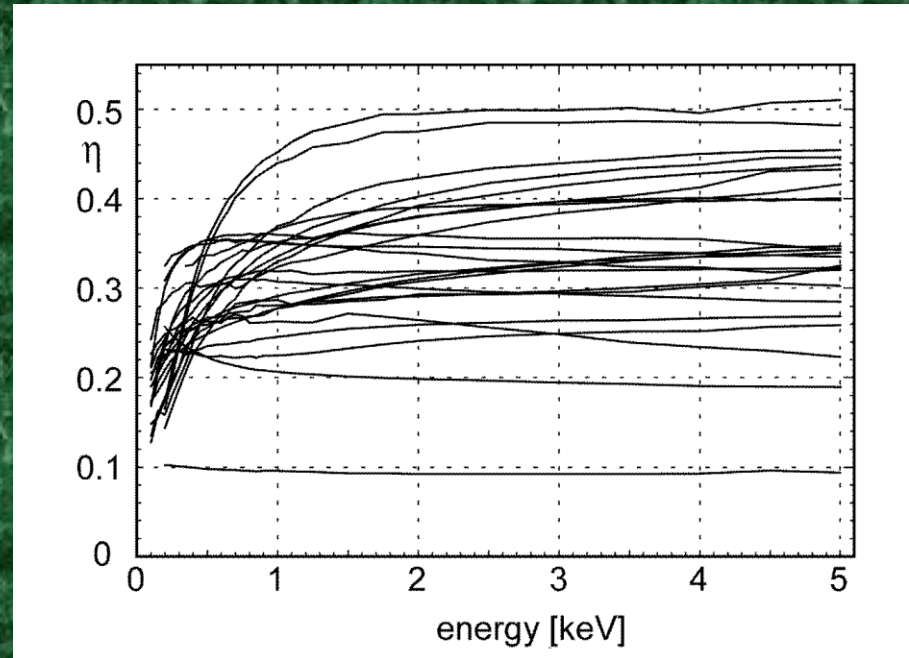
Emise elektronů – zpětně odražené elektrony

Výtěžek (v závislosti na energii):



„klasická“ data

Signál úměrný $Z \Rightarrow$
materiálový kontrast
(nad 5 keV !!)

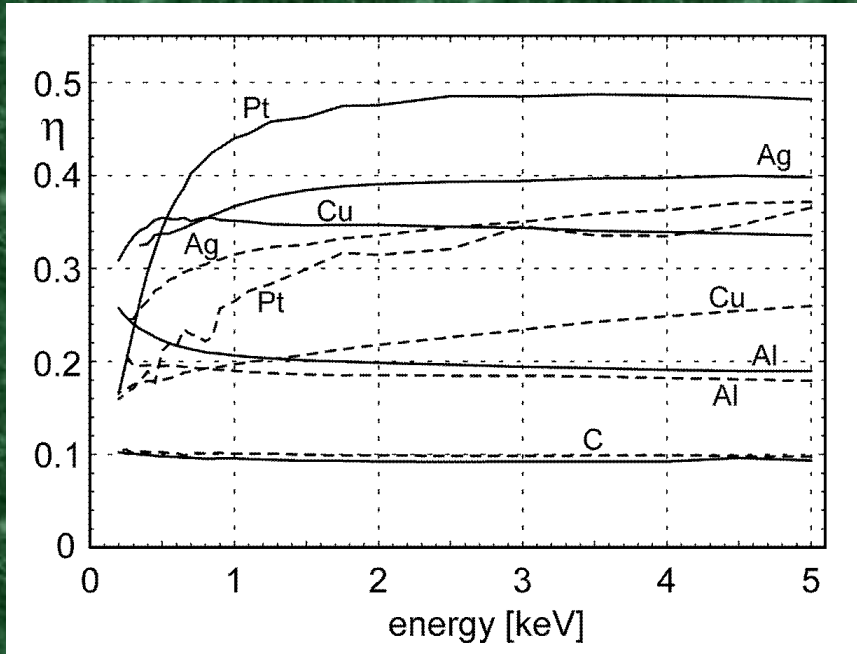


UHV data na površích čištěných iontovým bombardováním in-situ (M. Zadražil)

Pro 5 keV odpovídá atomovým číslům
(odshora): 79, 78, 82, 73, 72, 74, 64, 50,
47, 41, 40, 30, 42, 29, 48, 32, 28, 24, 26,
23, 22, 14, 13 a 6

Emise elektronů – zpětně odražené elektrony

Citlivost vůči stavu povrchu:

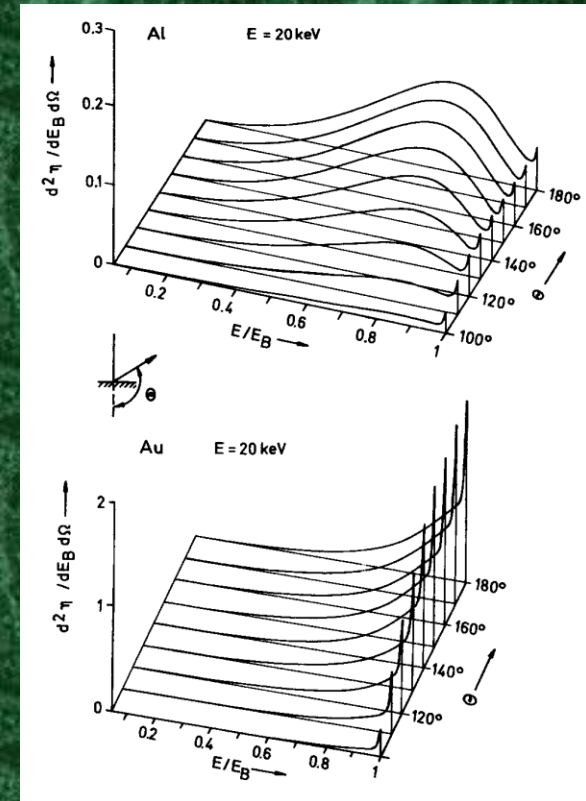


(M. Zdražil)

----- po vložení do UHV
 ————— po čištění ionty

Málo známý jev !!!

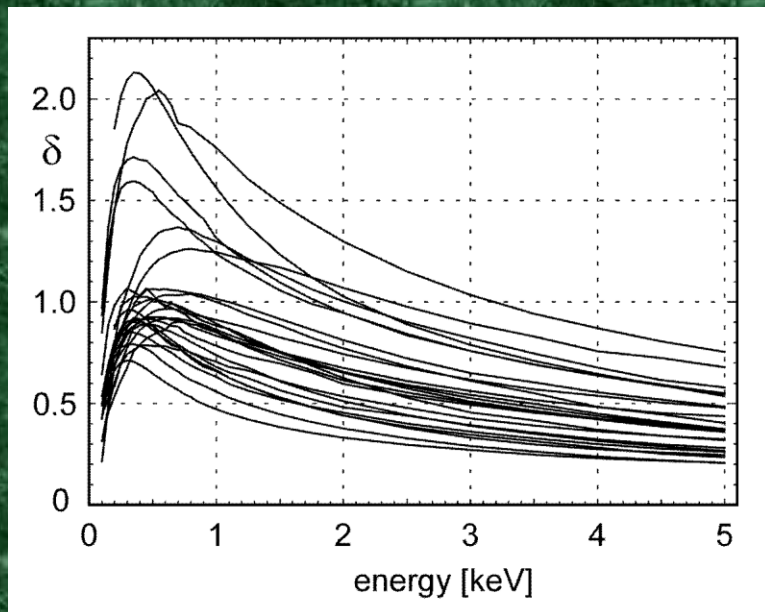
Energiové rozdělení:



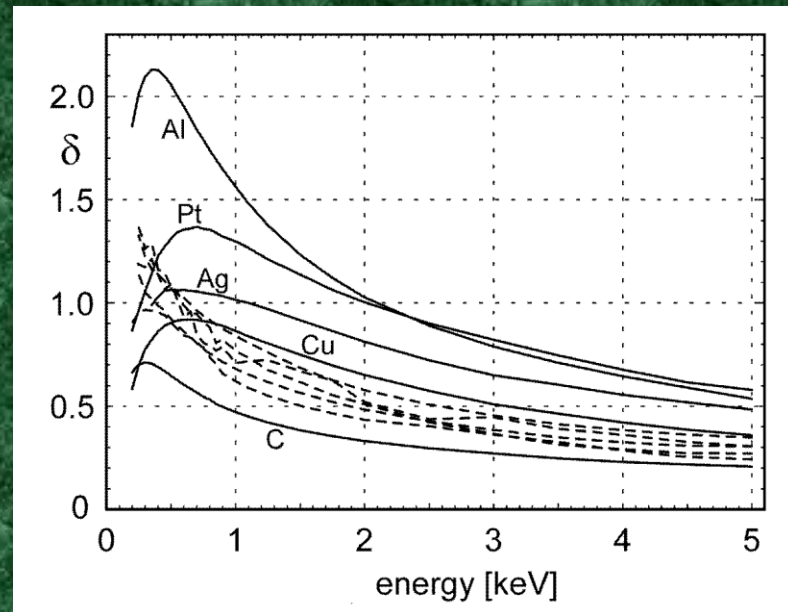
Maximum ve spektru BSE se objevuje pro lehké prvky a závisí na sběrových úhlech
 Střední energie BSE: cca 0,7 až 0,9 E_p

Emise elektronů – sekundární elektrony

Výtěžek (v závislosti na energii):



Citlivost vůči stavu povrchu:



UHV data na površích čištěných iontovým bombardováním in-situ (M. Zadražil)

----- po vložení do UHV
 ————— po čištění ionty

Pro 1 keV odpovídá atomovým číslům (odshora): 64, 13, 40, 78, 79, 72, 47, 30, 82, 50, 14, 29, 24, 48, 74, 73, 28, 32, 42, 26, 22, 41, 23 a 6

Závislost výtěžku na stavu povrchu se obecně předpokládá, ale málo se bere v úvahu při interpretaci obrazu

Emise elektronů – sekundární elektrony

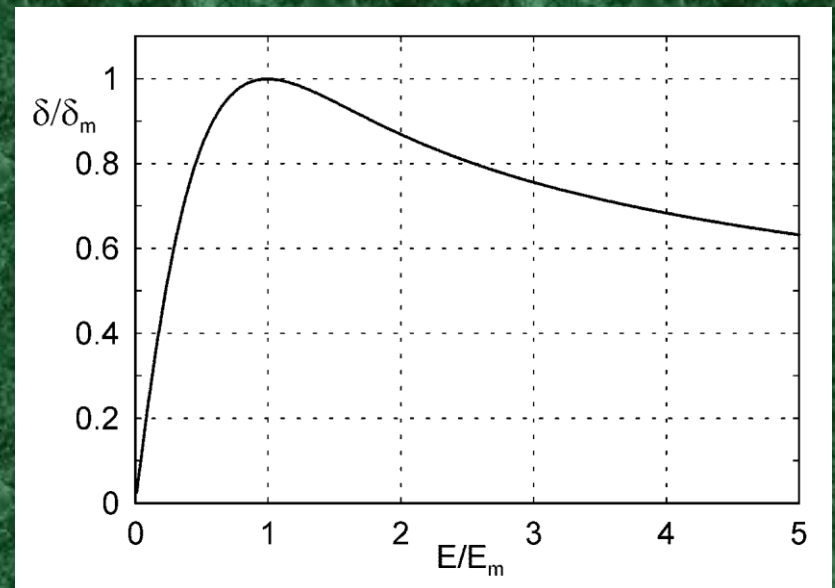
Výtěžek (v závislosti na energii):

Maximum výtěžku δ_m se dosahuje při energii E_m mezi 100 a 900 eV. Pro vodivé materiály se δ_m pohybuje mezi 0,5 a 2,5. U izolátorů je δ_m cca 3 až 20 díky větší hloubce úniku při absenci rozptylu na kvazivolných elektronech.

Semiempirický model:

$$\frac{\delta}{\delta_m} = 1,11 \left(\frac{E}{E_m} \right)^{-0,35} \left\{ 1 - \exp \left[-2,3 \left(\frac{E}{E_m} \right)^{1,35} \right] \right\}$$

Pro energie dostatečně vyšší než E_m klesá výtěžek úměrně $E^{-0,8}$.



Emise elektronů – sekundární elektrony

Energiové rozdělení:

*Experiment: maximum při cca 1 až 5 eV (pro izolátory nižší hodnoty),
pološířka mezi 3 a 15 eV*

Jednoduchý model (pro kovy):

$$\frac{d N_{SE}}{d E_{SE}} = K \frac{1}{E} \frac{E_{SE}}{(E_{SE} + \psi)^4}$$

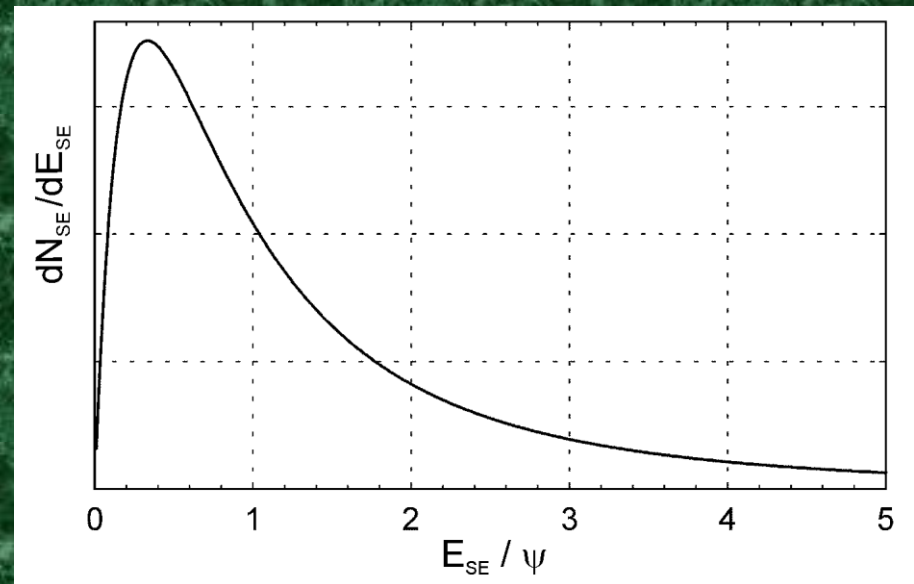
Maximum: $\psi / 3$

Střední hodnota: 2ψ

Medián: ψ

(ψ – výstupní práce)

Za typickou energii SE lze považovat 3 až 5 eV



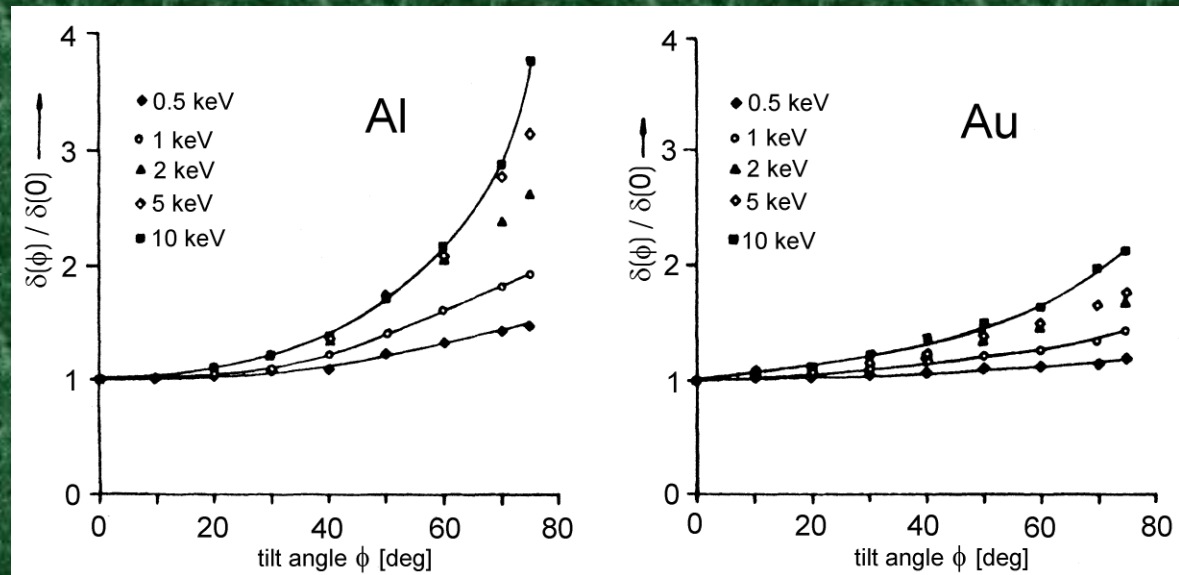
Emise elektronů – sekundární elektrony

Závislost výtěžku na náklonu vzorku:

$$\delta(\phi) \propto \sec^n \phi, \quad n = 1,3 \div 0,8$$

Hranový jev:

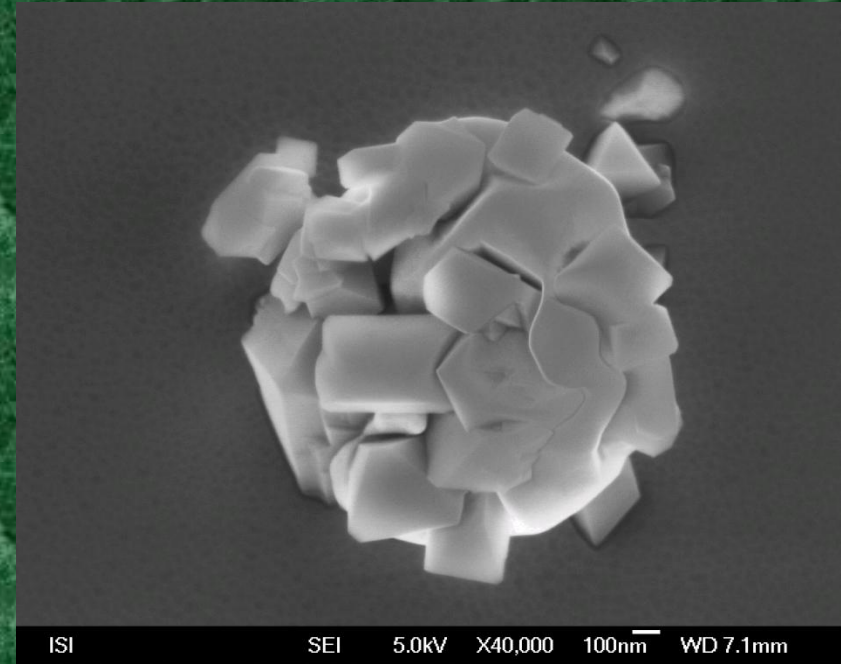
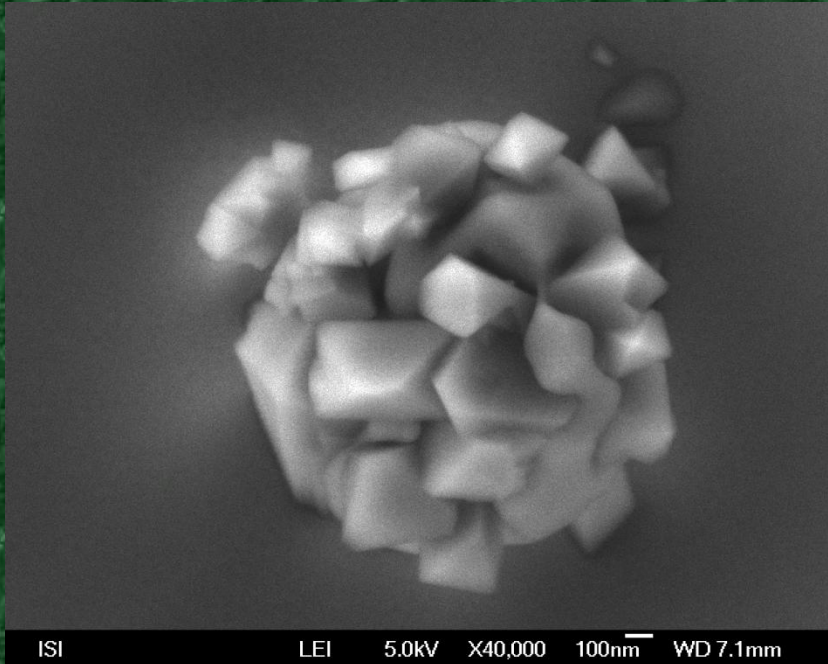
Přezáření kolmých hran a stěn povrchových stupňů



Závislost výtěžku na krystalové orientaci:

Podobně jako u BSE, méně výrazná (jednotky procent). Může se projevit selektivní reaktivita krystalových ploch, např. oxidace.

A co vlastně uvidíte?



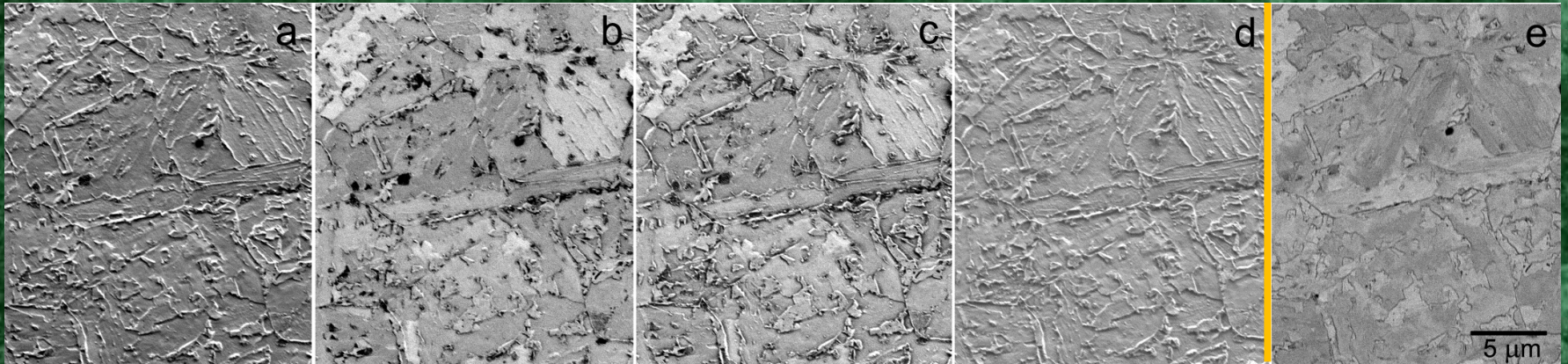
Spodní detektor

Horní detektor

*málo × hodně
odsává elektrony od povrchu vzorku*

To závisí na detektoru!

Elektrony odražené do určitých polárních úhlů přenášejí specifické kontrasty



Ocel typu TRIP (TRansformation Induced Plasticity) složená z bainitu-ferritu spolu s martenzitem a zbytkovým austenitem

Mikrosnímky při 500 eV, BSE signál, potenciál na vzorku:

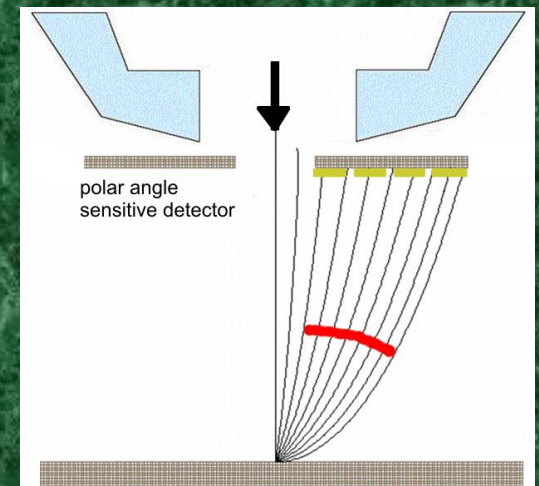
a – 17° až 30°, reliéfní a materiálový kontrast

b - 30° až 49°, materiálový kontrast a kontrast zrn

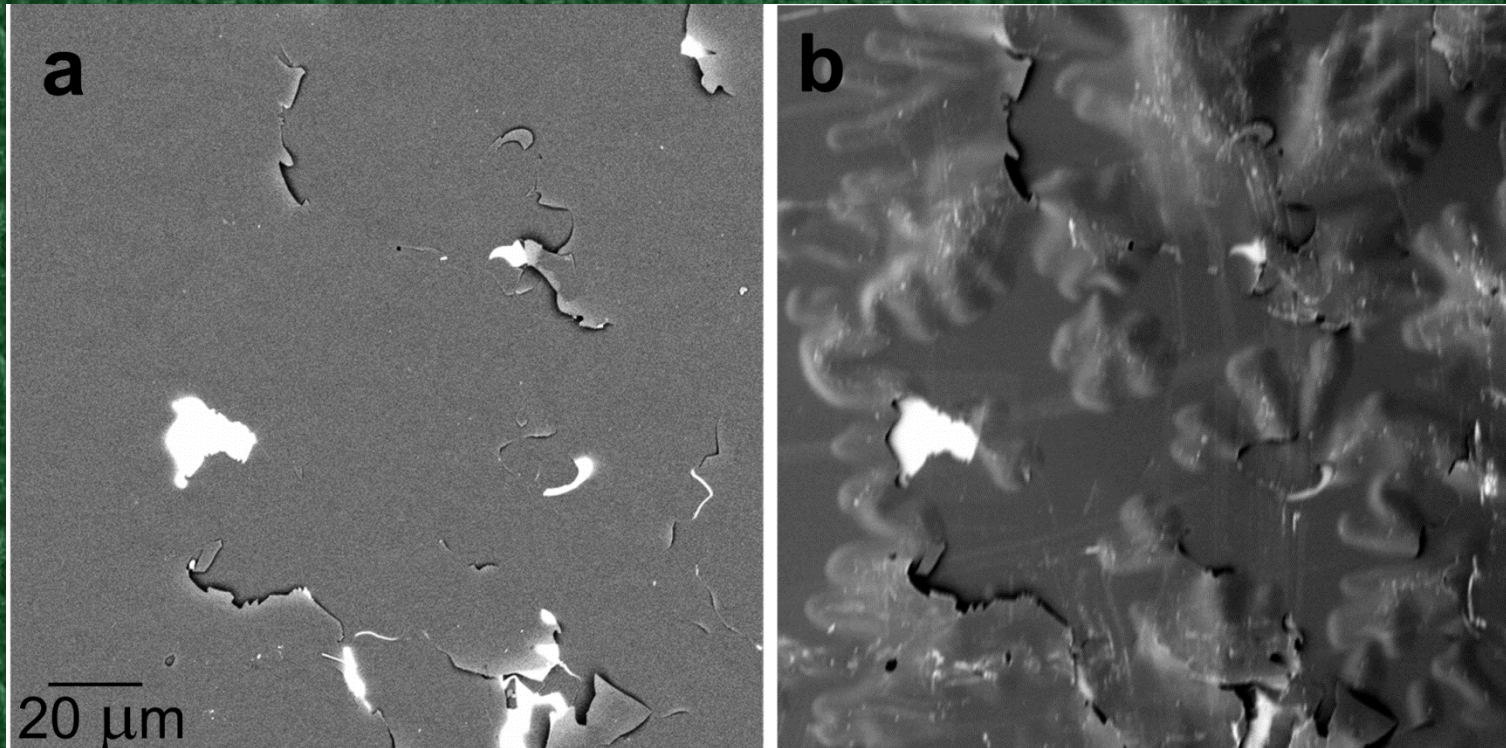
c - 49° až 72°, kontrast zrn se stopami materiálového a reliéfního kontrastu

d – 72° až 90°, čistý reliéfní kontrast

e – konvenční obraz v BSE při 4 keV



Povrchová citlivost



*Delaminovaná vrstva 200 nm CN_x , naprášená RF magnetronem na křemík (100):
 (a) BSE při 4 keV, (b) BSE při 500 eV (vzorek na potenciálu).*

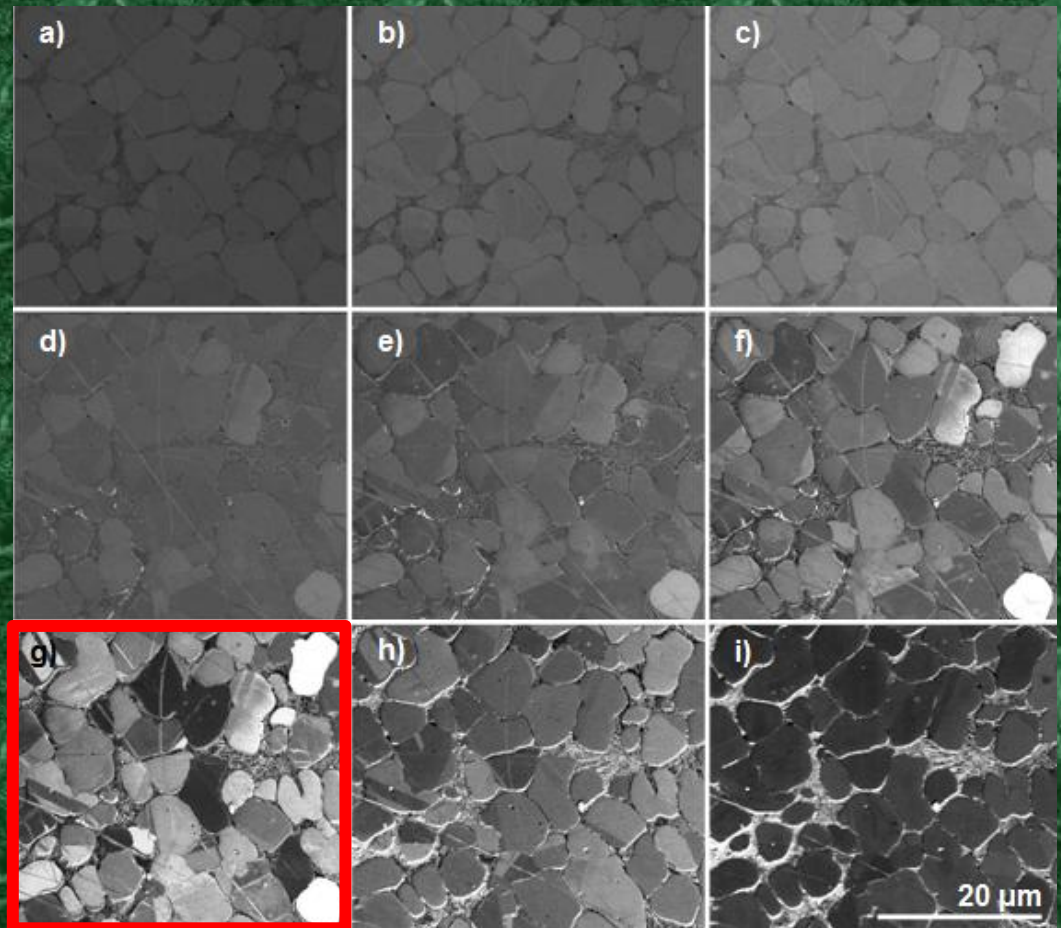
Energie elektronů „na míru“

Energiová závislost souhrnného signálu BSE

Vzorek na brzděném potenciálu, energie dopadu elektronů (při primární energii 6 keV):

- a) 6 keV,
- b) 5 keV,
- c) 4 keV,
- d) 3 keV,
- e) 2 keV,
- f) 1 keV,
- g) 500 eV,
- h) 100 eV,
- i) 10 eV

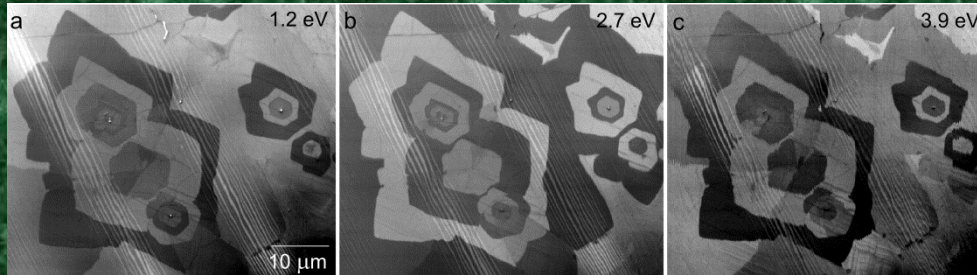
Energiové okno pro krystalografický kontrast je vymezováno informační hloubkou a detekcí BSE emitovaných pod vysokými úhly a stažených polem nad vzorkem



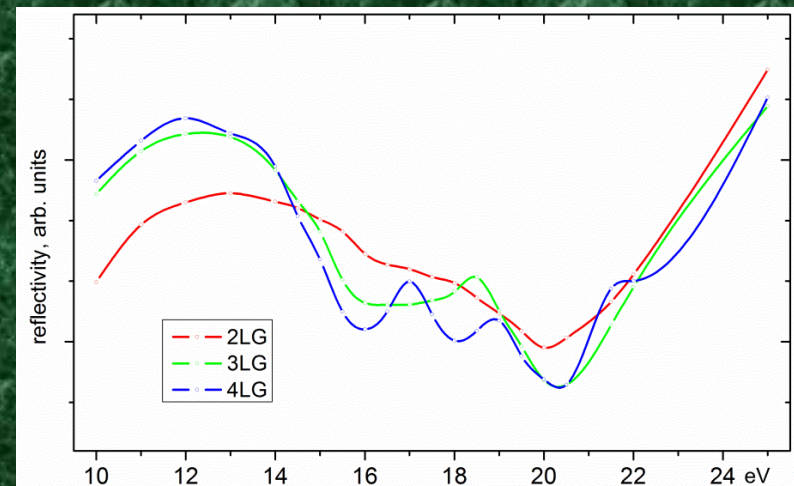
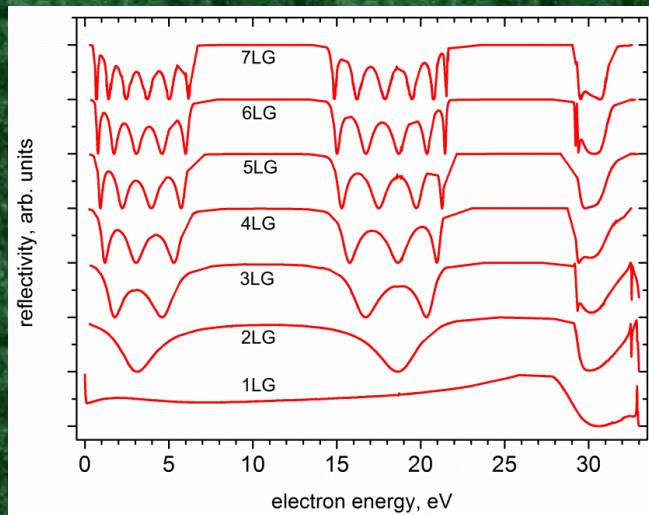
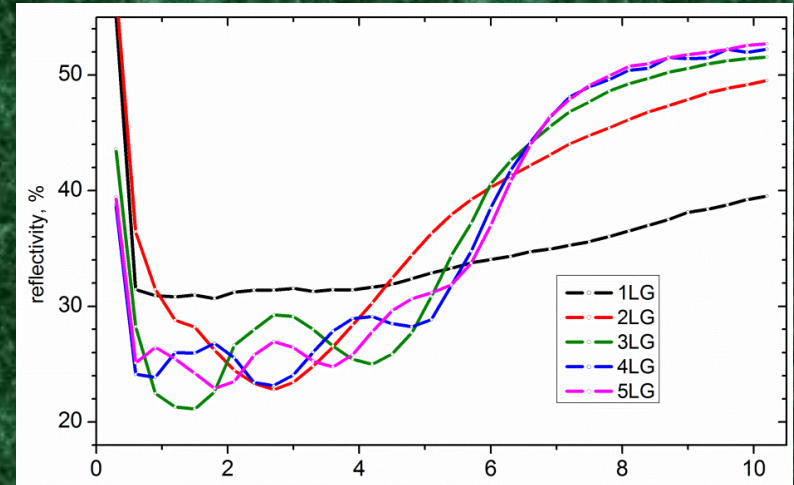
Ocel X210Cr12 zahřátá do polotekutého stavu při 1265°C a ochlazená, UHV, in-situ čištění ionty Ar

Odrazivost grafénu na podložce

BSE mikrosnímky:

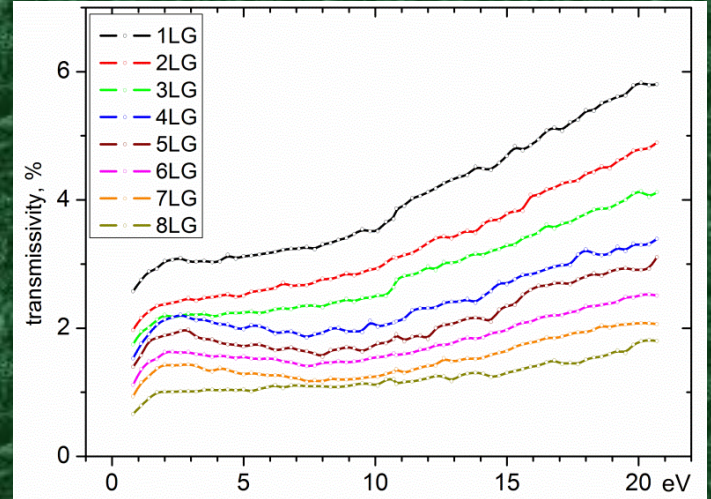
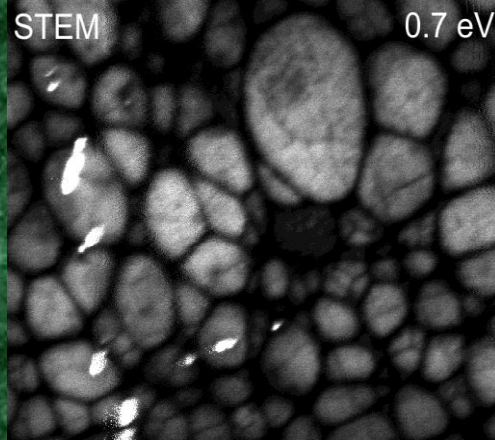
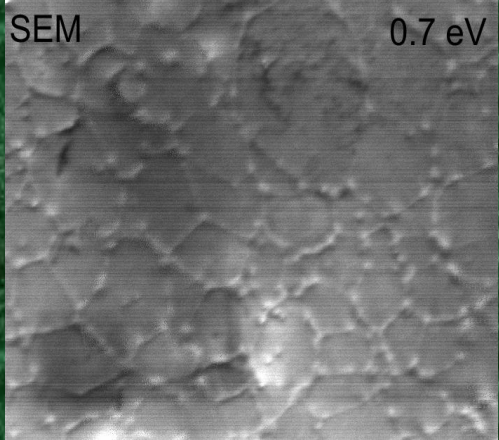
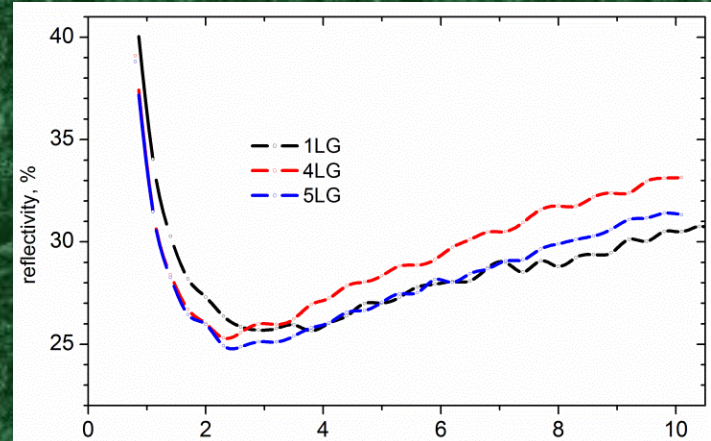
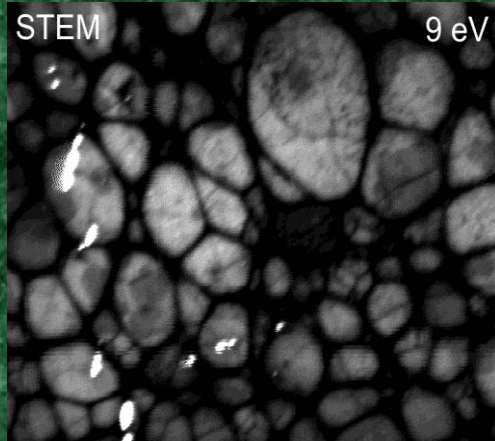
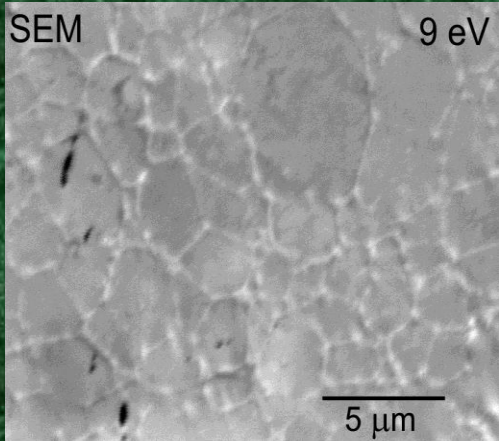


Energiové závislosti změřené odrazivosti:



Odrazivost simulovaná pomocí software na bázi DFT (Density Functional Theory)

Volný grafén na uhlíkové krajce



Odrazivost ani propustnost nevykazují významné fluktuaace



Děkuji za pozornost!