

**Doktori (Ph. D.) értekezés**

**keV-os ELEKTRONOK VISSZASZÓRT ENERGIASPEKTRUMÁNAK  
MONTE CARLO SZIMULÁCIÓJA**

Készítette:

**Orosz Gábor Tamás**

Kémia Doktori Iskola

Készült az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetben

Témavezető:

**Dr. Menyhárd Miklós**, a fizika tudomány doktora

**Veszprémi Egyetem**

**2003**

# keV-os ELEKTRONOK VISSZASZÓRT ENERGIASPEKTRUMÁNAK MONTE CARLO SZIMULÁCIÓJA

Értekezés doktori (Ph. D.) fokozat elnyerése érdekében  
a Veszprémi Egyetem Kémia Doktori Iskolája keretében

Készítette:  
**Orosz Gábor Tamás**

Témavezető:  
**Dr. Menyhárd Miklós**

Elfogadásra javaslom (igen / nem)

(aláírás)\*\*

A jelölt a doktori szigorlaton ..... % -ot ért el,

Veszprém,

.....  
a Szigorlati Bizottság elnöke

Az értekezést bírálóként elfogadásra javaslom:

Bíráló neve: ..... igen /nem

.....

Bíráló neve: ..... igen /nem

# Tartalomjegyzék

|                                                                                                  |           |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| TARTALOMJEGYZÉK.....                                                                             | 3         |
| KIVONAT.....                                                                                     | 4         |
| ABSTRACT.....                                                                                    | 4         |
| ZUSAMMENFASSUNG.....                                                                             | 5         |
| BEVEZETÉS.....                                                                                   | 6         |
| <b>I. IRODALMI ÁTTEKINTÉS.....</b>                                                               | <b>8</b>  |
| I.A. RUGALMAS SZÓRÁS.....                                                                        | 8         |
| I.A.1. Differenciális rugalmas szórási hatáskeresztmetszetek.....                                | 8         |
| I.A.2. Kölcsönhatási potenciálok.....                                                            | 9         |
| I.B. RUGALMATLAN SZÓRÁS.....                                                                     | 10        |
| I.B.1. A dielektromos függvény.....                                                              | 10        |
| I.B.2. Energiaveszteségi függvény.....                                                           | 11        |
| I.B.3. Az átlagos rugalmatlan szabad úthossz.....                                                | 13        |
| I.B.4. IMFP számítások.....                                                                      | 13        |
| I.C. ENERGIAVESZTESÉGEK A FELÜLET KÖZELÉBEN.....                                                 | 15        |
| I.D. EPES-REELS SPEKTRUMOK KIALAKULÁSA.....                                                      | 19        |
| I.E. EPES-MÓDSZER.....                                                                           | 21        |
| I.E.1. IMFP meghatározása összehasonlító mintával.....                                           | 22        |
| I.E.2. A módszer korlátai.....                                                                   | 23        |
| I.F. MONTE CARLO SZIMULÁCIÓ.....                                                                 | 24        |
| I.F.1. Jablonski-módszer.....                                                                    | 24        |
| I.F.2. EPES-REELS spektrumok szimulálása.....                                                    | 25        |
| I.F.3. Inhomogén minta mélységi összetételének mérése.....                                       | 26        |
| II.A. MONTE CARLO MODELL.....                                                                    | 28        |
| II.B. Si, Ge és Sn EPES-REELS SPEKTRUMOK SZIMULÁCIÓJA.....                                       | 33        |
| II.B.1. Vesztési spektrum szimulációja.....                                                      | 34        |
| II.B.2. A vesztési függvény meghatározása.....                                                   | 36        |
| II.B.3. Si szimuláció.....                                                                       | 37        |
| II.B.4. Ge szimuláció.....                                                                       | 41        |
| II.B.5. Sn szimuláció.....                                                                       | 45        |
| II.C. FELÜLETI GERJESZTÉSI PARAMÉTEREK MEGHATÁROZÁSA GE ÉS SI MINTÁKRA.....                      | 48        |
| II.D. Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> ÉS SiO <sub>2</sub> IMFP MEGHATÁROZÁSA EPES MÓDSZERREL..... | 53        |
| II.E. RÉTEGES SZERKEZETŰ MINTÁK EPES MÉLYSÉGI FELTÉRKÉPEZÉSE.....                                | 61        |
| <b>III. ÖSSZEFOGLALÁS.....</b>                                                                   | <b>81</b> |
| IRODALOMJEGYZÉK.....                                                                             | 83        |
| PUBLIKÁCIÓS JEGYZÉK.....                                                                         | 87        |
| <b>TÉZISPONTOK.....</b>                                                                          | <b>88</b> |
| <b>THESES.....</b>                                                                               | <b>89</b> |
| KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.....                                                                         | 90        |
| MELLÉKLET.....                                                                                   | 91        |

## Kivonat

A dolgozat szilárd mintákról visszaszórt  $keV$ -os elektronok mért energiaveszteségi spektrumát vizsgálja a  $0-70\text{ eV}$ -os tartományban. Kísérleti eredmények kiértékelésére a jelölt kidolgozott egy *Monte Carlo* modellt, mely alapján számítógépes, szimulációs programot készített. Mérések szimulációja során *polySi*, *amorfGe* és mikrokristályos *Sn* minták energiaveszteségi függvényeit, valamint a *polySi* és az *amorfGe* mintákra felületi gerjesztési paraméter értékeket határozott meg. A jelölt a  $SiO_2$  és  $Si_3N_4$  rétegeken mért rugalmas csúcs intenzitásokat felületi gerjesztésre korrigálta, és meghatározta a  $SiO_2$  és  $Si_3N_4$  átlagos rugalmatlan szabad úthossz értékeit. A jelölt multiréteg szerkezetű *Ge-Si* minták rugalmas csúcs mélységi feltérképezésének számítógépes szimulációját végezte különböző elektronenergián és mérési geometrián. Számított eredményei alapján inhomogén (rétegsoros) *Ge-Si* minta mélységi feltérképezésére optimális elektronenergiát és mérési geometriát határozott meg.

## Monte Carlo simulation of reflection electron energy loss spectra

Ph. D. Thesis

by

Gábor Tamás Orosz

## Abstract

The thesis investigates reflected electron energy loss spectra (*REELS*) measured on solid samples in the loss range of  $0-70\text{ eV}$ . A *Monte Carlo* model, and accordingly a software had been developed for evaluating measurements. Measured spectra of *polySi*, *amorphous-Ge* and microcrystalline *Sn* samples had been simulated. Energy loss functions of *polySi*, *amorphous-Ge* and microcrystalline *Sn* samples and also the surface excitation parameter (*SEP*) values of *polySi* and *amorphous-Ge* samples were determined. Surface corrections were made to elastic peak data measured on  $SiO_2$  and  $Si_3N_4$  thin layers. Applying these corrected elastic peak values the author determined inelastic mean free paths values of  $SiO_2$  and  $Si_3N_4$ , using his *Monte Carlo* program. The author simulated elastic peak depth profiling measurements on *Ge-Si* inhomogeneous (multilayer) samples. Optimum electron energy and measurement geometry for elastic peak depth profiling in an inhomogeneous sample were determined.

# **Monte Carlo Simulation von Energieverlustspektren von rückgestreuten Elektronen**

Dissertation

von

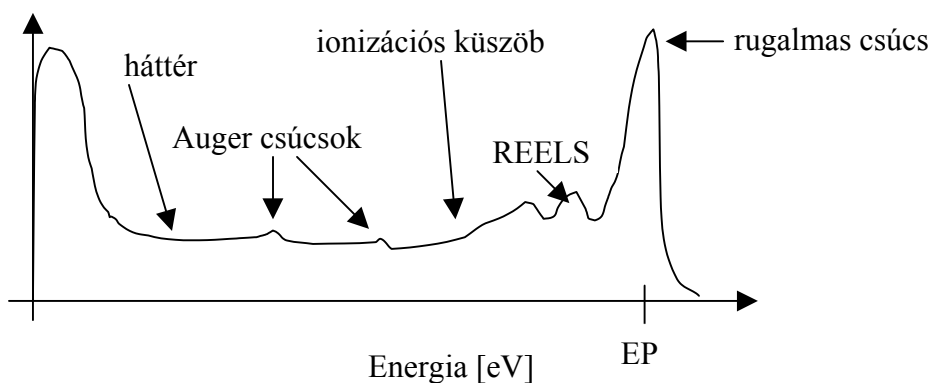
Gábor Tamás Orosz

## **Zusammenfassung**

Die Dissertation behandelt die Energieverlustspektren von  $KeV$  Elektronen, rückgestreut an Festkörperoberflächen. Der Kandidat hat ein Monte Carlo Modell und Computer Simulationsverfahren (Software) entwickelt zur Auswertung von experimentellen Ergebnissen. Mittels Simulation der Experimenten wurden die Energieverlustfunktionen von  $Si$ ,  $Ge$  und  $Sn$ , sowie die Oberfläche -anregungsparameter von *polySi* und *amorfGe* Proben bestimmt. Der Kandidat hat die elastische Peak Intensitäten von  $SiO_2$ ,  $Si_3N_4$  Schichten, sowie von Polyethylen Proben für Oberflächenanregung korrigiert und die mittlere freie Weglänge derselben bestimmt. Die Dissertation darstellt die Simulation die mit EPES (Elektronenspektroskopie der elastischen Peak) gemessene Tiefenprofile von  $Ge-Si$  Multischichten. Die Effekte der Messgeometrie und der Elektronenenergie wurden mit der Simulation nachgewiesen.

## Bevezetés

Felületek, vékony rétegek és rétegátmenetek fontos szerepet játszanak a modern technológiában, melyek sokoldalú vizsgálata szükséges. Egy lehetséges vizsgálati módszer az, hogy a felületet  $keV$ -os elektronokkal bombázzuk, és a visszaszórt elektronok energiaspektrumát analizáljuk, amiből a bombázott mintáról nyerhetünk információt. Ezen az elven alapul a felületérzékeny elektron spektroszkópiai módszerek közül például az *Auger* elektron spektroszkópia (*AES* - *Auger Electron Spectroscopy*) [1] és a visszaszórt elektronok veszteségi spektroszkópiája (*REELS* - *Reflection Electron Energy Loss Spectroscopy*) [2]. Az 1. ábra egy tipikus mért visszaszórt spektrumot mutat be a teljes energiatartományban.



1. ábra Visszaszórt elektronok energiaveszteségi spektruma

Ilyen spektrumnak szokásosan csak egy részét vizsgálják a különböző elektronspektroszkópiai módszerekkel végzett mérések. A teljes spektrum különböző fizikai folyamatok összességéként áll elő. A veszteség nélkül (rugalmasan) visszaszórt elektronoknak a rugalmas csúcs (*EP* - *Elastic Peak*) felel meg. A spektrumnak ezzel a tartományával a rugalmas csúcs elektron spektroszkópia (*EPES* - *Elastic Peak Electron Spectroscopy*) [3] foglalkozik. Azt megelőzik a kis energiaveszteségi csúcsok, az ionizációs csúcsok és az *Auger* csúcsok. A spektrumban észlelt csúcsok általában jelentős háttéren ülnek. Az *EPES-REELS* módszer a rugalmas csúcsot és a kis energiaveszteségi ( $\sim 0-100$  eV-os) részt, *AES* az *Auger* csúcsokat vizsgálja.

A mérésekben egy elektronforrásból megközelítőleg monoenergetikus elektronnyaláb éri a mintát. Az elektronok a mintán belül rugalmas és rugalmatlan szórásban vesznek részt. A mintát elhagyó elektronok egy részét szög és energia szerint detektálhatjuk. Mérési

eredmények kiértékeléséhez elektron transzport leírásra van szükség, hogy a rugalmas és rugalmatlan szórások együttes hatását értelmezzük. Elektron transzport sokféleképpen leírható, például elektromágneses elmélet, *Boltzmann*-egyenlet numerikus megoldása, dielektromos elmélet [4-10], stb. keretén belül. Ezek az eljárások részletes számításokat alkalmaznak a rugalmas és a rugalmatlan szórások leírására. A transzport folyamatokban sok jelenség megoldása analitikusan nem ismert. Ezért nagyon sok elmélet alkalmaz *Monte Carlo* (MC) szimulációs módszert [11-14], amely igen kényelmes eszköz a változó mérési körülmények viszonylag könnyű kezelésére.

Célom egy egyszerű, hatékony eljárás kidolgozása, mellyel kísérleti elektronspektroszkópiai eredményeket tudok kiértékelni.

Kifejlesztettem egy MC szimulációs modellt, amely *keV*-os elektronok transzportját képes leírni egy- és többkomponensű, homogén és inhomogén mintákban.

*EPES-REELS* kísérletek készültek az MFA-ban a *DESA 100* [15] és az ATOMKI-ban az *ESA 31* [16] spektrométerekkel. *polySi*, *amorfGe* és mikrokristályos *Sn* minták [17] *EPES-REELS* mért spektrumait szimuláltam. *polySi* és *amorfGe* minták felületi gerjesztési paraméter (*SEP* - *Surface Excitation Parameter*) értékeit határoztam meg. Ezeket a *SEP* adatokat összehasonlítottam Gergely [18] és Werner [19] adataival, és jó egyezést találtam. Werner, valamint Chen *SEP* képletei és anyagi paraméter adatai [20], továbbá Kwei *SEP* adatai [21] alapján felületi korrekciót végeztem a mért rugalmas csúcs intenzitásokra. A korrigált értékekkel meghatároztam *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* minták tényleges *IMFP* adatait a 300-2000 *eV*-os tartományban. Kétkomponensű *Ge-Si* réteges szerkezetű minták mélységi eloszlásának *EPES* méréseit szimuláltam. Megvizsgáltam a többszörös rugalmas szórás szerepét és megmutattam azt, hogy egy inhomogén (rétegsoros) minta esetén milyen mérési körülményeket célszerű választani.

Az első fejezetben irodalmi áttekintést adok, melyben ismertetem a különböző módszerek alapelveit és eredményeit. A második fejezetben saját módszeremet és annak alkalmazásait mutatom be. A harmadik fejezetben összefoglalom eddigi eredményeimet.

## I. Irodalmi áttekintés

### I. A. Rugalmas szórás

#### I. A. 1. Differenciális rugalmas szórás hatáskeresztmetszetek

Amikor szilárd mintában egy  $E$  energiájú elektron rugalmas szórásban vesz részt, eredeti haladási iránya megváltozik. Az irányváltozást jellemezhetjük a  $\vartheta$  szórási szöggel. Azt, hogy az elektron eredeti irányához képest más, tetszőleges irányba milyen valószínűséggel térül el, a rugalmas szórásra vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszet (*EDCS - Elastic Differential Cross Section*),  $d\sigma/d\Omega$  határozza meg. Ez egy folytonos, szög szerinti eloszlásfüggvény. Az elektron haladási irányának megváltozását leírhatjuk egy, az elektronhoz rögzített koordináta-rendszerben. Polár koordináta-rendszerben a hatáskeresztmetszet megadja, hogy az elektron milyen valószínűséggel térül el  $d\Omega = d\vartheta d\varphi$  elemi térszöggel a  $\vartheta_{sz}$ ,  $\varphi_{sz}$  szórási szögekkel jellemzett irányban. Egy egyszerű modellben az elektron a mintában az izoláltnak tekintett atomok magpotenciálján szóródik rugalmasan. Nagy elektron energiáknál ( $E > 200 \text{ eV}$ ) jól alkalmazható Born első közelítése [22], és a szilárdtest hatásokat, az atomi elektronok árnyékoló hatását gyakorlatilag elegendő ennél alacsonyabb energiákon figyelembe venni [3,11]. Rugalmas szórásra a legegyszerűbb közelítést a  $d\sigma_R/d\Omega$  Rutherford hatáskeresztmetszet szolgáltatja a Rutherford szórási egyenlet alapján [23-24]:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} \sim \frac{Z^2}{E^2 \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}. \quad (I.A.1.1)$$

A rugalmas hatáskeresztmetszet  $\vartheta$ -n kívül látható módon függvénye még a  $Z$  rendszámnak és az  $E$  energiának is. Bauer és Browne úttörő munkáját követően [25] Fink és munkatársai [26-28], majd Riley és MacCallum [29] több elemre publikáltak hatáskeresztmetszeti adatokat. Megbízható differenciális hatáskeresztmetszeti adatokat kvantummechanikai számítások útján nyerhetünk. Mott megbízható eljárást közölt a hatáskeresztmetszetek számítására [30]. Ichimura és munkatársai nagy energiatartományban számították ki a Mott-féle hatáskeresztmetszetet,  $d\sigma_M/d\Omega$ -t, melyeket táblázati formában is közöltek [31]. Bevezették a Mott-együtthatót,  $R_M$ -et:



$$\frac{d\sigma_M(E, Z, \vartheta)}{d\Omega} = R_M \frac{d\sigma_R}{d\Omega}, \quad (I.A.1.2)$$

ahol az egyenlet jobb oldalán szereplő differenciális hatáskeresztmetszetet az (I.A.1) képlet definiálja. Reimer és Loedding [24] a relativisztikus Dirac-egyenlet megoldásával számították ki a Mott-féle hatáskeresztmetszeteket. Hatáskeresztmetszet számításokat, táblázati adatokat több átfogó munka publikált [32-34]. NIST (National Institute of Standards and Technology) által közzétett legújabb adatbázisban [35] a rugalmas hatáskeresztmetszeti adatokat Salvat és Mayol algoritmus alapján [36] Jablonski számította ki a parciális hullámok módszerével [34].

## I.A.2. Kölcsönhatási potenciálok

A szórás leírására használt atomi potenciál megválasztása befolyásolhatja a visszaszórt elektronok szögeloszlását. Jablonski és Powell megmutatta, hogy szokásos mérési körülmények között az irodalomban használt potenciál okozta eltérések elhanyagolhatók [37]. Nem szokványos mérési körülmények esetén azonban a potenciál megválasztása lényeges lehet. Jelenleg Salvat hatáskeresztmetszet adatait tartom a legmegbízhatóbbnak [35]. Ebben a munkában a hely függvényében a kölcsönhatási potenciál [35]:

$$V(r) = -e\Phi(r) + V_{exc}(r), \quad (I.A.2.1)$$

ahol  $r$  a helyzeti koordináta,  $\Phi(r)$  pedig az atom elektrosztatikus potenciálja:

$$\Phi(r) = \frac{Ze}{r} - e \frac{1}{r} \left( \int_0^r \rho_e(r') 4\pi r'^2 dr' + \int_r^\infty \rho_e(r') 4\pi r' dr' \right). \quad (I.A.2.2)$$

$\rho_e(r)$  az elektronsűrűség,  $V_{exc}(r)$  pedig az atomi és a bombázó elektron közötti lokális kölcsönhatást írja le:

$$V_{exc}(r) = \frac{1}{2} [E + e\varphi(r)] - \frac{1}{2} \left\{ [E + e\varphi(r)]^2 + 4\pi \frac{\hbar^2 e^2}{m} \rho_e(r) \right\}^2. \quad (I.A.2.3)$$

Az (I.A.2.1) egyenlettel leírt kölcsönhatási potenciált tehát teljesen meghatározza a  $\rho_e(r)$  elektronsűrűség.

## I.B. Rugalmatlan szórás

### I.B.1. A dielektromos függvény

Amikor egy  $E$  energiájú,  $v$  sebességű elektron szilárd testben halad, azzal kölcsönhatásba lép. Ennek következtében az elektron energiát veszíthet, a szilárd testet gerjesztheti. A dielektromos elmélet keretén belül elektron és szilárd test kölcsönhatásának leírására legegyszerűbb közelítés a jellium modell. E modell pozitív töltések egyenletes háttérében mozgó szabad elektronokat tételez fel, elhanyagolva a valós szilárd testek sáv szerkezetét. A dielektromos elméletben az elektronok és a szilárd test közötti energia- és impulzuscsere felfogható a szilárd test dielektromos válaszáként, amely a dielektromos függvénnyel,  $\varepsilon(q, \omega)$ -val tökéletesen leírható. Jellium modell alapján elsőként Lindhard határozott meg  $\varepsilon(q, \omega)$ -t [6]. Ebben a modellben ún. plazmonvesztések történnek, mely veszteség egyetlen plazmonfrekvenciával,  $\omega_p$ -vel jellemezhető. Ez a plazmonfrekvencia a szabad elektronok legnagyobb intenzitású gerjesztése és egyben a különböző gerjesztések frekvenciájának átlagos értéke. A plazmongerjesztés frekvenciája [38]:

$$\omega_p^2 = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m^*}}, \quad (I.B.1.1)$$

ahol  $n$  az elektronsűrűséget,  $m^*$  az elektron effektív tömegét,  $e$  az elektron töltését jelölik. A dielektromos függvény kifejezhető az  $\omega_p$  plazmonfrekvenciával [39-41]:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_q^2 - \omega_p^2 - \omega(\omega + i\gamma)}, \quad (I.B.1.2)$$

ahol

$$\omega_q^2 = \omega_p^2 + \frac{3v_F^2 q^2}{5} + \frac{\hbar^2 q^4}{4m_0^2}, \quad (I.B.1.3)$$

$v_F$  pedig a Fermi sebesség.

$q$  azt az impulzust jelöli, melyet a külső töltés a szilárd test elektronjainak ad át,  $\omega = T / \hbar$  pedig azt a frekvenciát, amely az elektron  $T$  energiaveszteségét írja le.  $\gamma$  a csillapodási állandó,  $m_0$  pedig az elektron nyugalmi tömege.

## I.B.2. Energiaveszteségi függvény

Jelölje  $K(E,T)dT\delta R$  kifejezés azt a valószínűséget, hogy egy  $E$  energiájú elektron, miközben  $\delta R$  távolságot tesz meg, rugalmatlan szórásban vesz részt és a  $[T, T+dT]$  intervallumba eső energiaveszteséget szenved.  $K(E,T)$  az energiaveszteségi függvény. Ez egy energia szerinti eloszlásfüggvény, mely meghatározza, hogy egy  $E$  energiájú elektron milyen valószínűséggel veszít  $T$  energiát.  $K(E,T)$   $T$ -től többnyire erősen, míg  $E$ -től gyengén függ. Így amikor az elektron relatív energiavesztesége kicsi,  $K(E,T)$   $E$ -től való függése első közelítésben elhanyagolható [8]. A dielektromos függvény ismeretében a veszteségi függvényt meghatározhatjuk. Egységnyi út megtétele során annak a valószínűsége, hogy egy  $E$  energiájú elektron  $T$  energiát veszít [42-43]:

$$K(E,T) = \frac{1}{\pi E a_0} \int_{q^-}^{q^+} dq \frac{1}{q} \text{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} \right], \quad (I.B.2.1)$$

ahol  $a_0$  a Bohr sugár. Egyszerű plazmonveszteség esetén (I.B.1.2) egyenletből:

$$\text{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} \right] = \frac{\omega \gamma \omega_p^2}{(\omega^2 - \omega_q^2)^2 + \omega^2 \gamma^2}. \quad (I.B.2.2)$$

Optikai mérések alapján, ahol nincs impulzusátadás ( $q=0$ ), sok anyagra ismert a dielektromos függvény [44]. Ezért a következő jelölést használjuk:  $\varepsilon(\omega) \equiv \varepsilon(\mathbf{0})$ . A dielektromos függvény a következő kapcsolatban van az optikailag mérhető  $n(\omega)$  törésmutatóval és a  $k(\omega)$  extinció tényezővel:

$$\varepsilon(\omega) = (n + ik)^2 = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2, \quad (I.B.2.3)$$

ahol

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (I.B.2.4)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk. \quad (I.B.2.5)$$

A veszteségi függvény ezekből kifejezve:

$$K(E,T) = \text{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} \right] = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} = \frac{2nk}{(n^2 + k^2)^2}. \quad (I.B.2.6)$$

A Drude modell szerint [45] a dielektromos függvény a plazmonfrekvenciával a következőképpen fejezhető ki:

$$\varepsilon(\mathbf{0}) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (I.B.2.7)$$

Valós szilárd testek energiavesztesége bonyolult folyamat. Ennek leírására szokásos eljárás, hogy első lépésben az optikai mérésekből származó dielektromos függvényt  $D(\gamma, \omega_j, \omega)$  Drude-típusú függvények összegeként állítjuk elő [7]:

$$\text{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(0)} \right] = \sum_{j=1}^n A_j D(\gamma_j, \omega_j, \omega), \quad (I.B.2.8)$$

a  $q \neq 0$  tartományban pedig ez a kifejezés a következőképpen extrapolálható [7]:

$$\text{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} \right] = \sum_{j=1}^n A_j D(\gamma_j(q), \omega_j(q), \omega), \quad (I.B.2.9)$$

ahol

$$D(\gamma_j, \omega_j, \omega) = \frac{\gamma\omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}. \quad (I.B.2.10)$$

Az  $\varepsilon(q,\omega)$  dielektromos függvény meghatározására különböző számítások ismertek. Több szerző alkalmazta a jellium modellt és tanulmányozta szabad elektronok dielektromos válaszát Lindhard típusú dielektromos függvénnyel [46-52]. A számítások azt mutatják, hogy néhány anyag, pl. *Al* vagy *Si* esetén a jellium modell kiválóan alkalmazható [51,53], egyszerű sávszerkezetű fémek és félvezetők veszteségei a jellium modell kis korrekciójával elvégezhetők [54-55].

### I.B.3. Az átlagos rugalmatlan szabad úthossz

A mozgó elektron energiaveszteségének vizsgálatakor fontos annak az ismerete, hogy az adott közegben milyen gyakran fordulnak elő rugalmatlan szórások. Ezt a gyakoriságot az átlagos rugalmatlan szabad úthossz, az *IMFP* (*Inelastic Mean Free Path*) fizikai paraméterrel tudjuk számszerűsíteni, amely az az átlagos távolság, amit egy  $E$  energiájú elektron egy szilárd testben megtesz két rugalmatlan szórás között. Az energiaveszteségi függvényből meghatározható az *IMFP*. Adott  $K(E,T)$  energiaveszteségi függvény esetén az átlagos rugalmatlan szabad úthossz (*IMFP*),  $\lambda_i(E)$  [42-43]:

$$\lambda_i(E) = \frac{1}{\int_0^E K(E,T) dT}. \quad (I.B.3.1)$$

### I.B.4. IMFP számítások

Az irodalomban különböző modellek alapján számítottak *IMFP* adatokat, melyeket táblázati formában is publikáltak. A számítások szokásosan homogén közeget feltételeznek, és a szabad úthossz irányfüggésétől eltekintenek. Lundquist részletesen tanulmányozta a bombázó elektron és szabad elektron gáz kölcsönhatását [47], mely számítások alapján később Shelton [50] *IMFP* értékeket határozott meg. Hasonlóan, Quinn is meghatározott *IMFP* értékeket jellium modellt feltételezve [46]. Quinn és Shelton *IMFP* adatai elfogadhatók olyan anyagokra, melyre a jellium modell alkalmazható (pl. homogén, egyelemű szilárd testekre, melyek nem átmeneti fémek vagy nemesfémek), melyekben a rugalmatlan gerjesztések dominánsan plazmongerjesztések. Quinn *IMFP* értékeire Penn korrekciókat végzett [51]. Figyelembe vett elektron-kicserélődést és korrelációt, és azt találta, hogy ezek az *IMFP* értékeket mintegy 10-20%-kal megnövelték. A Lundquist-Shelton [47,50] számításokat magasabb energiákon is elvégezte, egészen 4000 eV-ig, és azt találta, hogy az *IMFP*-k 200 eV felett 10-25%-al kisebbek voltak, mint a Quinn elméletből származók. Penn ezután kombinálta eljárását a Lundqvist-Shelton elmélettel; a Quinn

elmélethez képest az *IMFP*-k tipikusan kb. 5%-kal kisebbek voltak. Végül Penn korrekciót végzett az *IMFP*-re, figyelembe véve a törzselektronok hatását, melyet a jellium modell figyelmen kívül hagy.

1987-ben Penn az *IMFP* meghatározására kifejlesztett egy algoritmust [54], amely modell dielektromos függvényre [6] épült, és figyelembe vette a rugalmatlan szórás momentum-függését is. Az így meghatározott dielektromos függvény megbízhatóan alkalmazható olyan anyagokra is, melyeknél a jellium modell már nem megfelelő [55]. Megjegyzendő azonban, hogy az *IMFP* értékekben a momentum-függés csak kis korrekciót okoz. Tanuma és munkatársai alkalmazták Penn algoritmusát, és 50-2000 *eV*-ig 56 anyagra (elemekre, szerves és szervetlen vegyületekre) optikai adatokból *IMFP* értékeket határoztak meg [56-60]. Ezen számításokat alapul véve egy interpolációs egyenletet is meghatároztak, amivel az eredeti Bethe egyenletet [61] a következőre cserélték:

$$\lambda_i = \frac{E}{E_p^2 [\beta \ln(\gamma E) - (C/E) + (D/E)^2]}, \quad (I.B.4.1)$$

ahol  $E_p = 28.8 \sqrt{\frac{N_v \rho}{M}}$  jellium modellben a plazmon energia *eV*-ban,  $N_v$  atomonként a valencia elektronok száma,  $M$  az atomtömeg,  $\rho$  a sűrűség és  $E$  az elektron energiája. A  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $C$  és  $D$  paramétereket a szerzők a számított *IMFP* értékekhez illesztették. Az *IMFP* számítások eredményei alapján  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $C$  és  $D$  paraméterekre a következő összefüggést adták meg:

$$\beta = -0.0216 + \frac{0.944}{\sqrt{E_p^2 + E_g^2}} + 7.39 \times 10^{-4} \rho, \quad (I.B.4.2)$$

$$\gamma = 0.191 \rho^{-0.50}, \quad (I.B.4.3)$$

$$C = 1.97 - 0.91U, \quad (I.B.4.4)$$

$$D = 53.4 - 20.8U, \quad (I.B.4.5)$$

$$U = \frac{N_v \rho}{M}. \quad (I.B.4.6)$$

Az (I.B.4.1)-(I.B.4.6) egyenleteket *TPP-2M* formulának hívjuk [62]. Ezekből az egyenletekből az *IMFP* jó közelítéssel meghatározható bármely anyagra. Közvetlen mérés hiányában ez a valódi *IMFP*-hez közeli érték a legmegbízhatóbb a jelenlegi szakirodalom szerint.

### I.C. Energiaveszteségek a felület közelében

A dielektromos elméletben az elektron energiát veszít, miközben a mintát (dielektrikumot) gerjeszti. Lindhard egyenletébe [6] helyettesítve az elektron töltését, megkapjuk a  $v$  sebességű elektron egységnyi  $dx$  távolság megtétele során  $W$  energia veszteségét:

$$\frac{dW}{dx} = \frac{2e^4}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dq}{q} \int_0^{qv} d\omega \omega \operatorname{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right]. \quad (I.C.1)$$

Ez a kifejezés egy végtelen mintában, egyenes vonalú pályán mozgó elektronra érvényes, és az elektron irányváltozását, valamint a minta felületének létezését nem képes leírni. Homogén, félvégtelen anyagban tetszőleges pályán mozgó elektron rugalmatlan szórásának részletes tárgyalását több munkában megtalálhatjuk [42,63-65]. E munkák figyelmen kívül hagyják, hogy a felület közelében a gerjesztések eltérnek a térfogati energiaveszteségektől. Plazmongerjesztés a felület mindkét oldalán történik. Jelölje  $\varepsilon_l$  a dielektromos függvény valós részét a mintán belül, mely a Drude modell alapján:

$$\varepsilon_l = \operatorname{Re} \varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (I.C.2)$$

Maxwell egyenlete alapján a minta határán a dielektromos függvény előjelet vált,  $\varepsilon_l' = -\varepsilon_l$ , ahol  $\varepsilon_l'$  jelöli a mintán kívül a dielektromos függvény valós részét, amely az (I.C.2) egyenlet alapján

$$\varepsilon_1' = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - 1. \quad (I.C.3)$$

Ebből az egyenletből  $\omega_s = \omega$ , a felületi plazmongerjesztés frekvenciája kifejezhető:

$$\omega_s = \omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_1'}}. \quad (I.C.4)$$

Ha a mintán kívül vákuum van, mely dielektromos állandója  $\varepsilon_1'=1$ , megkapjuk a felületi plazmonfrekvenciát [66]:

$$\omega_s = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}. \quad (I.C.5)$$

Ezt a frekvenciaértéket olyan feltételezések mellett kaptuk, hogy a felület végtelen kiterjedésű, tökéletesen sima, a minta dielektromos válaszát pedig Drude modellel írtuk le. Ha a felületen kis gömböket tételezünk fel, és a felületi plazmonfrekvenciát így határozzuk meg [67], akkor  $\omega = \omega_p / \sqrt{3}$ . Ha a minta dielektromos válaszát nem Drude modellel írjuk le, a felületi plazmonfrekvencia egy általánosabb alakját kapjuk meg [68]:

$$\omega_R = \frac{\omega_p}{\sqrt{2 + \varepsilon_B}}, \quad (I.C.6)$$

ahol  $\varepsilon_B$  a vezetési sáv dielektromos tényezőjének valós része:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_B(\omega) + 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (I.C.7)$$

A felületi plazmon tulajdonságai közül annak diszperziós relációjára vonatkozó összefüggéseket több szerző közölt. E munkák szerint a felületi plazmongerjesztésnek nemcsak az energiája, hanem diszperziós relációja is eltér a tömbtől. Bontsuk fel a



momentumot a felülettel párhuzamos ( $q_{\parallel}$ ) és rá merőleges ( $q_{\perp}$ ) komponensekre! A felületi plazmonok diszperziós relációját leíró első tag  $q_{\parallel}$ -tól lineárisan függ [69]:

$$\omega_{sp}(q_{\parallel}) = \omega_R(1 + \alpha_S q_{\parallel}), \quad (I.C.8)$$

ahol  $\alpha_S$  az elektronsűrűségtől függő állandó. A térfogati plazmonok diszperziós relációja ugyanakkor  $q_{\parallel}$ -tól négyzetesen függ. Fémek felületének vizsgálata a felületi plazmon negatív diszperziós relációjának, továbbá magasabb rendű felületi gerjesztési módusok kimutatását eredményezte [70].

Az 1970-es évektől a felületi gerjesztések kvantummechanikai tárgyalása hozott jelentős eredményeket. Ezekből a számításokból az derült ki, hogy a felületi plazmon energiát a tömbi dielektromos állandó határozza meg, és nem valamilyen felületi tulajdonság. Az elméleti számításokat kísérleti eredmények igazolták [71-74]. Fontos megjegyeznünk, hogy egyszerű fémek esetén a jellium modellel a felületi gerjesztés jól leírható. Az diszperziós relációnak vizsgálata azonban kvadratis összefüggésre vezetett [75].

A felületi gerjesztések vizsgálata az 1990-es évek utolsó felében újra előtérbe került. A felületi gerjesztések leírását több módszerrel megtehetjük, például a lokális, a hidrodinamikai, az *SRM* (*Specular Reflection Model* - tükörszerűen visszaverődő) modellekkel. Összehasonlításukat megtalálhatjuk Nagatomi és munkatársai átfogó munkájában [76]. További eljárást közölt Werner, mely a parciális veszteségeken alapul [77]. Ezeknek az elméleteknek egyike sem kitüntetett.

Az elektron energiaveszteségét szétválaszthatjuk térfogati és felületi részekre:

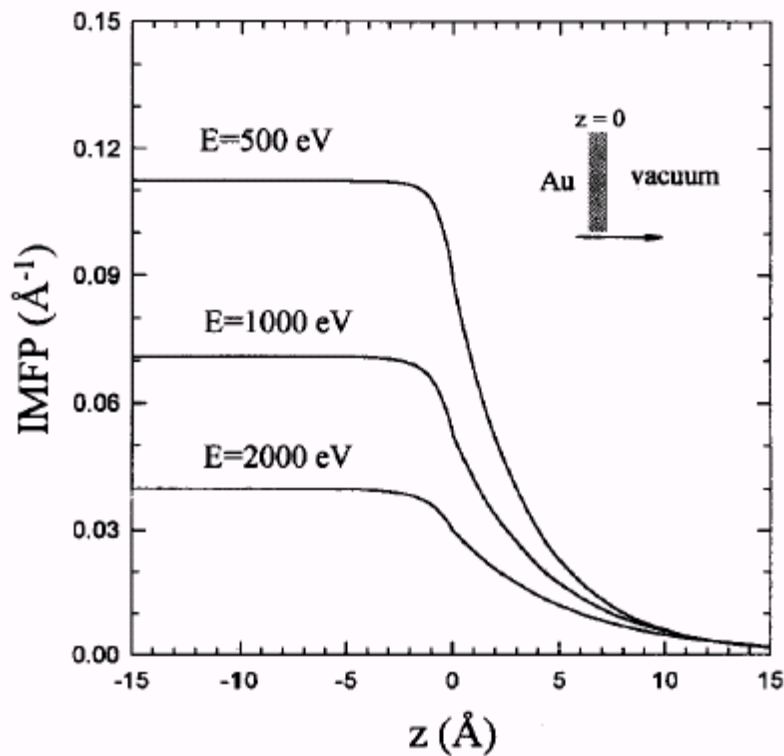
$$W_t = W_B + W_s. \quad (I.C.9)$$

Tougaard és Yubero a dielektromos elmélet keretén belül egyetlen elektron pályáját írták le, és felületi és térfogati veszteségi függvényeket határoztak meg [9].

Chen irányfüggő *IMFP*-t határozott meg, melyet szétválasztott  $\lambda_B$  térfogati és  $\lambda_S$  felületi *IMFP*-re [20]:

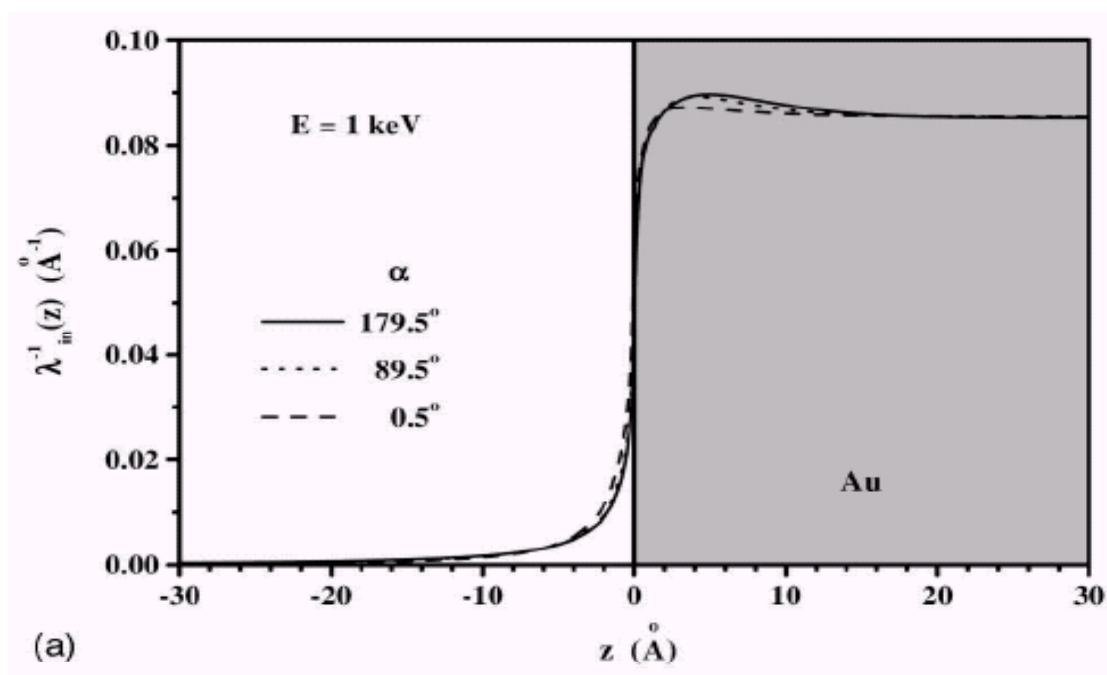
$$\frac{1}{\lambda(E, \alpha, z)} = \frac{1}{\lambda_B(E, \alpha, z)} + \frac{1}{\lambda_S(E, \alpha, z)}, \quad (I.C.10)$$

ahol  $\lambda_B(E, \alpha, z)$  és  $\lambda_S(E, \alpha, z)$  *IMFP*-k a felület közelében változnak. A 2.a. ábra, melyet Chen cikkéből [78] illesztettem be, az (I.C.10) egyenlet bal oldalán látható  $\lambda(E, \alpha, z)$  reciprokanak változását mutatja be *Au* esetén néhány elektron energiára (ezért az y tengely felirata helyesen  $1/IMFP$  volna):



**2.a. ábra** *Au* inverz *IMFP* értékének változása a felület közelében Chen számítása alapján

Hasonlóképpen, *Au*-ra Ding is meghatározott mélység szerint változó inverz *IMFP* értékét [79], melyet a 2.b. ábrán láthatunk. Az ábrán, melyet Ding cikkéből [79] illesztettem be, az inverz *IMFP* értékek három különböző detektálási szögre láthatók. Chen ábráján a pozitív  $z$  tartomány jelöli a vákuum oldalt, míg Dingnél fordítva, a negatív  $z$  jelenti a vákuumot.



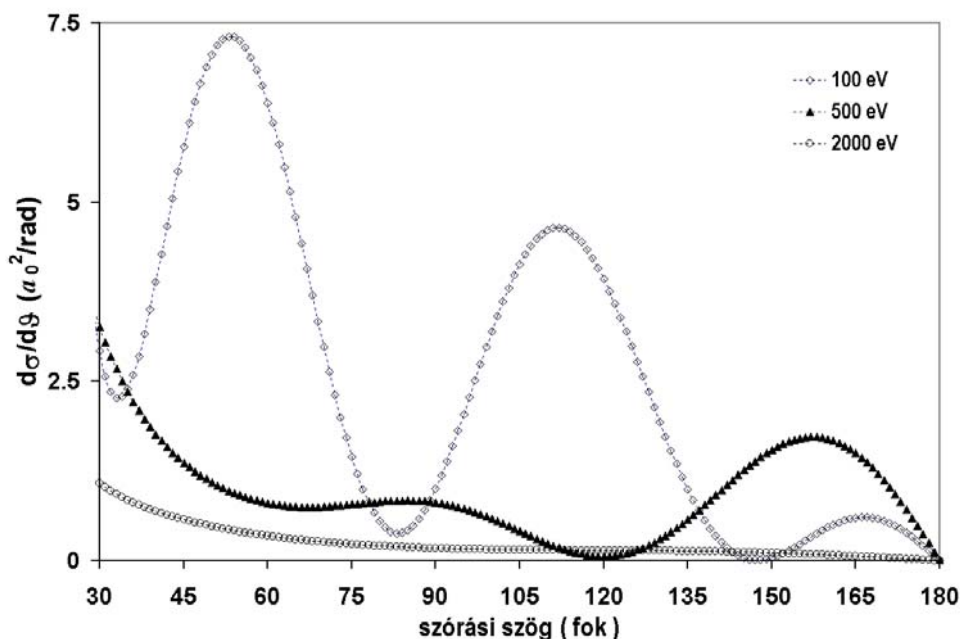
**2.b. ábra** Au inverz IMFP értékének változása a felület közelében Ding számítása alapján

Chen és Ding számításai hasonló menetű függvényekre vezetnek. A két modell alapján nyert számszerű értékek azonban eltérnek egymástól. Ding inverz IMFP értékei Chen adataihoz képest a mintán belül nagyobbak, a vákuumban kisebbek. Ding adatai a mintán kívül gyorsabban csökkennek. A szerzők hasonló modellt alkalmaznak, számításuk mégis eltérő eredményekre vezet. Ezért az ilyen részletes számítások alkalmazhatósága mérések kiértékelésekor kérdésessé válik.

## I.D. EPES-REELS spektrumok kialakulása

Elektronspektroszkópiai mérésekben egy forrásból adott  $\alpha_i$  beesési szöggel jellemzett irányban,  $E_0$  primer energiájú elektronok bombázzák a mintát. A mintában az elektron irányt változtathat, és energiát veszíthet. Végül, bizonyos valószínűséggel  $\alpha_d$  detektálási szögben,  $E$  energiával elhagyja a mintát, melyet szög és energia szerint detektálhatunk. Az irány- és az energiaváltozásokat rendre a rugalmas és a rugalmatlan szórások határozzák meg. Az, hogy a detektált elektronok mekkora távolságot tesznek meg a mintán belül, bonyolult transzport folyamatok eredménye. Ha azt vizsgáljuk például, hogy a bombázó elektronoknak a  $2\pi$  radián fél térszögben mekkora hányada hagyja el a mintát energiavesztés nélkül, az IMFP kiemelkedő szerepet játszik. Két szélső esetben: 1./ amikor az IMFP nulla körüli érték, akkor nagy valószínűséggel minden egyes elektron

veszteséget szenved, mielőtt a mintát elhagyná. 2./ ha az *IMFP* értéke nagyon nagy, akkor nagyon sok elektron hagyja el a mintát energiavesztés nélkül. A valós *IMFP* értékek természetesen a két szélső érték között vannak. Az *IMFP* mellett fontos szerepe van a rugalmas szórásnak is. Az anyagra jellemző rugalmas differenciális hatáskeresztmet(ek) meghatározzák, hogy mely szögre erősebb a szórás intenzitása. A 3. ábrán néhány energián látható *Ge* hatáskeresztmetszete.

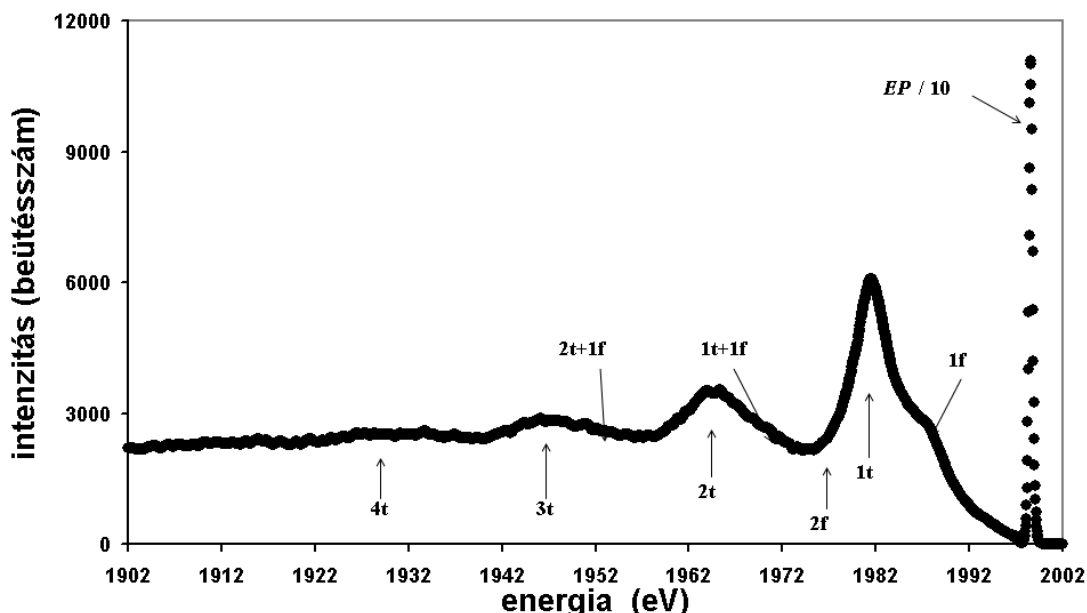


**3. ábra** *Ge* differenciális hatáskeresztmetszete

Látható, hogy a nagyszögű visszaszórásnak 100 *eV* elektron energiánál  $\theta=110^\circ$ -nál van a legnagyobb valószínűsége. Ha a mintát elhagyó elektronokat más irányban detektáljuk, akkor feltehető, hogy a detektált elektronok nagyobb utat tesznek meg a mintán belül, és útjuk során több rugalmatlan szórásban vesznek részt.

Visszaszórt elektronok energiavesztési spektrumában a legnagyobb intenzitású csúcs a rugalmas csúcs, *EP*, mely azokat az elektronokat tartalmazza, melyek a mintát közel primer (*E<sub>p</sub>*) energiával hagyták el. A spektrum rugalmas csúcsot megelőző része egy- és többszörös plazmongerjesztéseket tartalmaz. A 4. ábrán *Si* spektrumot láthatunk. *Si*-nál a plazmonvesztések a dominánsak, és jól megfigyelhetők az egyszeres, kétszeres és háromszoros térfogati plazmoncsúcsok (1t, 2t, 3t), valamint az egyszeres felületi

plazmoncsúcs (1f). Néhány további (kétszeres felületi: 2f, egyszeres felületi + egyszeres térfogati: 1t+1f, illetve egyszeres felületi+kétszeres térfogati: 1f+2t) plazmongerjesztés helyét is feltüntettem az ábrán. Ez utóbbi gerjesztések helyét a spektrumban kiszámítottam, és a várható energiáknál berajzoltam.



4. ábra ESA 31 elektron spektrométeren mért Si 2.0 keV spektrum

Ha ránézünk egy ilyen spektrumra, többnyire nehézséget jelent az egyes gerjesztések szétválasztása. A veszteségi spektrum egésze háttéren ül, ezért például szükséges a háttérlevonás alkalmazása [63]. Fontos, hogy *EPES-REELS* spektrumok vizsgálatakor a rugalmas és rugalmatlan szórásokat megbízhatóan leírjuk.

## I.E. EPES-módszer

Gergely György nevéhez fűződik a rugalmas csúcs elektron spektroszkópiai (*EPES*) módszer [80], amely rugalmas csúcs méréseket végez, és ennek segítségével határoz meg *IMFP* értékeket. Gergely úttörő munkájában egyszeres rugalmas elektron visszaszórást tételezett fel, és azt találta, hogy a rugalmasan visszaszórt elektronok intenzitása arányos a minta *IMFP*-jével. Eszerint egy adott mérésben, a rugalmas visszaszórási tényező,  $r_e$ , mely a rugalmasan visszaszórt elektronok és a belépő elektronok hányadosa, a következőképpen adható meg [80]:

$$r_e = N_A \sigma_B \frac{\cos \alpha_d}{1 + \cos \alpha_d} \lambda, \quad (I.E.1)$$

ahol  $N_A$  a mintában az atomi sűrűség,  $\sigma_B$  a teljes rugalmas hatáskeresztmetszet,  $\alpha_d$  a detektálási szög és  $\lambda$  az *IMFP*. Mivel  $N_A$ ,  $\sigma_B$ ,  $\alpha_d$  és  $r_e$  ismertek,  $\lambda$  elvileg meghatározható.

A rugalmas szórás leírásakor feltételezzük, hogy az elektron az izoláltnak tekintett atomok magpotenciálján szóródik. A közelítés akkor alkalmazható, amikor a minta felületi rétege megfelelően rendezetlen, amorf. Az *EPES* módszer alkalmazható például akkor, amikor a mérés olyan mikrokristályos mintákon történik, melyre teljesül, hogy a kristályok mérete az elektronnyaláb átmérőjénél jóval kisebb. Ekkor az elektronok átlagolják a mikrokristályok orientációit. A másik általánosan alkalmazott eljárás, hogy a mintát ionnyalábbal porlasztják, mely a felületi réteg amorfizálását idézi elő. Gondosan kell eljárni, hogy az amorfizálás megfelelő legyen, mert az *EPES*-ben az orientációs hatások a rugalmas csúcs intenzitását megnövelhetik [81]. A modell koherens rugalmas szórásra és diffrakcióra nem érvényes.

### I.E.1. *IMFP* meghatározása összehasonlító mintával

A rugalmas visszaszórási tényező abszolút mérése igen bonyolult feladat, és csak egy laboratóriumban sikerült azt megvalósítani [82]. Azonban ha megmérjük két minta rugalmas csúcsát, az (I.E.1) egyenlet alapján a mért intenzitások arányából az *IMFP* arányok kifejezhetők:

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{N_1 \sigma_1}{N_2 \sigma_2} \cdot \frac{\lambda_1}{\lambda_2}, \quad (I.E.1.1)$$

ahol az egyes mintákat 1 és 2 indexekkel különböztetjük meg. Jelölje 1 index azt az anyagot, amelyiknek *IMFP* értékét meg akarjuk határozni (minta), és 2 azt, amelyiknek az *IMFP* értékét ismerjük (referencia minta).  $I_1$  és  $I_2$  a mért értékek,  $N_1$  és  $N_2$  ismert atomi sűrűségek,  $\sigma_1$  és  $\sigma_2$  pedig (az irodalomból vehető) teljes rugalmas hatáskeresztmetszetek. A meghatározandó *IMFP* érték,  $\lambda_2$  így:

$$\lambda_2 = \frac{I_2 N_1 \sigma_1}{I_1 N_2 \sigma_2} \cdot \lambda_1. \quad (I.E.1.2)$$

Tehát ha  $\lambda_1$  értékét ismerjük, az (I.E.12) egyenlet alapján  $\lambda_2$  meghatározható. Fontos hangsúlyozni, hogy ahhoz, hogy a módszer alkalmazható legyen, mindkét minta felületi rétegének megfelelően rendezetlennek (amorfnak) kell lennie. Ugyanakkor megjegyzendő, hogy *EPES* mérésekben a diffrakciós hatások jelentősen függenek a mintától, az elektron- és ionenergiától, továbbá a mérési elrendezéstől is [3].

Rugalmas csúcs mérésekből először Gergely Jablonskival és munkatársaival határozott meg *IMFP* értékeket [83]. Az elektron többszörös rugalmas szórását Jablonski vette figyelembe először, és határozott meg rugalmas csúcs mérésekből *IMFP* értéket, *MC* modellel [84]. Jablonski *MC* algoritmus alapján az *EPES* módszerrel, a szokásos Jablonski eljárással több elemre, polimerre határoztak meg *IMFP* értékeket [85-88]. A relatív *IMFP* kísérleti meghatározásának a mai napig a legmegbízhatóbb módszere Gergely György által javasolt eljárás az *EPES* módszerrel [89].

### **I.E.2. A módszer korlátai**

Meg kell jegyeznünk, hogy ha *EPES* módszerrel határozunk meg *IMFP*-t, a kapott értékek különböző fizikai folyamatok okozta bizonytalanságot is tartalmazhatnak. A *Monte Carlo* eljárás alkalmazásakor szükségünk van a rugalmas visszaszórási tényező értékére. Ha ez alapján határozzuk meg az átlagos rugalmatlan szabad úthossz értékét, a mért és a számított *IMFP* adatok között magasabb energiákon jó egyezést, míg alacsonyabb energiákon eltérést tapasztalunk [90]. Egyik oka ennek az eltérésnek a jelentősebb szennyeződés és a felületi gerjesztés hatása lehet [91]. Nem megfelelő energiafelbontás esetén a rugalmas csúcs és a rugalmatlan veszteségek átlapolnak. Olyan esetben viszont, amikor az energiafelbontás megfelelően jó, *EPES* mérésekben ez nem szokott problémát okozni [87]; ekkor a rugalmas csúcs alatti területet (integrált) mérjük [92]. Amikor az *IMFP* értékét referencia minták segítségével határozzuk meg, a meghatározott érték természetesen erősen függ a referencia *IMFP* adatok megbízhatóságától. Korábban referencia anyagok szokásosan *Ni* és *Ag* voltak, csak az utóbbi időben merült fel, hogy ezeknek az anyagoknak szabad úthossz adatai nem megbízhatók, elsősorban a felületi gerjesztés hatása miatt [17].

A minta felületi durvasága miatt a visszaszórási tényező csökken, ezért az *IMFP*-t alulbecsüljük [89]. Ugyanígy, a felület durvulása a felületi gerjesztés valószínűségét is módosítja [93]. Ezek együttes hatása kiszámíthatatlan. A felületi durvaság hatását

minimalizálhatjuk, ha olyan referencia minta segítségével határozzuk meg az *IMFP*-t, amely felületi durvasága hasonló a mintáéhoz. Szennyezett felületi réteg befolyásolhatja a rugalmas visszaszórási tényezőt, mely hatás alacsony energián (50-100 eV) jelentős lehet [89]. A szennyeződést ezért célszerű *AES* és *XPS* (*X-ray Photoelectron Spectroscopy* - fotoemissziós spektroszkópia) mérésekkel ellenőrizni. Ha kristályhatásokat észlelünk *EPES* mérés során, a visszaszórási tényezőben ez szintén bizonytalanságot okozhat [3]. Az elektronnyaláb áramának stabilnak kell lennie a mérés során. Ha ez megváltozik, az *IMFP* értékét jelentősen befolyásolhatja [89].

## **I.F. Monte Carlo szimuláció**

A *Monte Carlo* (*MC*) módszert Neumann János dolgozta ki 1945-ben, amely egy matematikai eszköz, és alkalmas arra, hogy véletlen események sorozatával oldjunk meg determinisztikus problémákat. Manapság a fizika csaknem összes területén széleskörű alkalmazása van a determinisztikus és statisztikus problémák megoldásának. Ilyen statisztikus probléma az elektron transzportja is szilárd anyagban. E módszer alkalmas arra, hogy olyan fizikai paramétereket származtassunk, melyeket más módszerekkel különösen nehezen határozhatunk meg (például rugalmas visszaszórási tényező).

### **I.F.1. Jablonski-módszer**

A relatív *IMFP* meghatározására Jablonski *MC* modellje a következő feltételezéseket alkalmazza:

- (1) A rugalmas szóróközpontok jól közelíthetők izolált atomok potenciáljával.
- (2) Az elektron az anyagban pályája mentén irányt változtat a rugalmas szórás során.
- (3) A sokszoros rugalmas szórást a Poisson eloszlás írja le.

A rugalmas szórást jellemző polárszögek eloszlását a rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszete (*EDCS*) határozza meg, az azimutális szögek pedig egyenletes eloszlásúak. Az *MC* kód szórásonként számítja a  $\vartheta_{sz}$  és  $\varphi_{sz}$  szórási szögeket. Az elektronpályákat nyomon követi mindaddig, míg az elektron a mintát el nem hagyja. A szimuláció meghatározza az egyes elektronok által megtett teljes úthosszakat. A rugalmas



visszaszórási áram a megtett  $s$  úthosszal  $\exp(-s/IMFP)$  szerint gyengül [84].  $\exp(-s/IMFP)$  egyenlő a detektált elektronok parciális visszaszórási tényezőjével. Nagyszámú ( $N$ ) elektronra nyert parciális rugalmas visszaszórási tényező átlagolásával a rugalmas visszaszórási tényező kiszámítható:

$$r_e = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \exp(-s_i / IMFP). \quad (I.F.1.1)$$

Az *MC* modell tökéletesen sima felületet és rendezetlen (amorf) mintát feltételez, és nem érvényes koherens rugalmas szórás esetén.

A módszer a rugalmas szórást írja le részletesen, míg az energiaveszteségek részleteit figyelmen kívül hagyja. A gerjesztéseknek csak a gyakoriságát veszi figyelembe az *IMFP* segítségével, a felületi effektusokat (beleértve a felületi veszteségeket is) nem számítja.

## I.F.2. EPES-REELS spektrumok szimulálása

Tougaard javaslatot tett arra, hogy *EPES-REELS* spektrumok alapján hogyan határozzuk meg az energiaveszteségi függvényt [42]. Az elektron transzportot linearizált Boltzmann-egyenlettel írta le. Az elektronok pontszerű, egymással kapcsolatban nem álló ütközésekben vesznek részt, melyek közt az elektron a félvégtelen, homogén mintában kölcsönhatás nélkül teszi meg a (repülési) távolságokat. A számításban Tofterup munkája nyomán [94] egy egyszerűsítő feltételezést tartalmaz, melyben az úthosszra vonatkozó valószínűségi eloszlásfüggvény exponenciális. Későbbi munkájában [43] Tougaard egyszerű, könnyen alkalmazható képleteket javasolt a veszteségi függvények meghatározására. Tougaard eljárása a mért spektrumból közvetlenül kiszámítja az energiaveszteségi függvényt. A módszer hátránya, hogy nem tartalmaz felületi veszteségi járulékot, ezért csak olyan valódi spektrumokra használható, amelyeknél a felületi szórás elhanyagolható.

Pázsit és Chakarova *EPES-REELS* spektrumokat Monte Carlo szimulációval számolt, és kimutatta, hogy általánosságban a visszaszórt elektronok úthosszának valószínűségi eloszlásfüggvénye nem modellezhető exponenciális függvénnyel [95]. A legtöbb esetben, különösen könnyű elemekre és nagy energiákon az úthosszeloszlás maximumot mutat a rugalmas szórás hatáskeresztmetszetében az előreszórás nagy valószínűsége miatt. Ebben a munkában a *Monte Carlo* szimulációval származtatott úthossz eloszlási statisztika mellett

megtalálhatjuk rugalmas és rugalmatlan szórásszám statisztikákat is. Vicanek elméleti számítást végzett az ilyen statisztikák összefüggésére vonatkozóan, és kimutatta, hogy milyen egy-egyértelmű kapcsolat van az úthossz és a szórásszám statisztikák között [96]. Megmutatta, hogy Tougaard durva modellje ellenére is a számítások elfogadható eredményeket adnak. Chen és Ding a dielektromos elmélet keretében végzett részletes számításait alkalmazták *Monte Carlo* szimulációs eljárásaikban, mellyel visszaszórt elektronspektrumokat értékelték ki [20,79].

A *Monte Carlo* szimulációk sok esetben elhanyagolják a felületi veszteségeket [5,84]. Ez nagy energián,  $E > 5 \text{ keV}$ -on többnyire jó közelítés. A szokásosan detektált *Auger* elektronok energiája azonban 50-1000  $eV$  között van, tehát az *IMFP*-t ebben az energia tartományban kell leginkább ismerni.

A felületi és a térfogati gerjesztések külön választása természetesen megtörténik, amikor egy mélység szerint változó felületi és tömbi energiaveszteségi függvényt alkalmazunk. A térfogati energia veszteségek: plazmonveszteségek, sávok közti és sávon belüli gerjesztések, ionizációs veszteségek leírására alkalmazhatunk analitikus képleteket [97-99]. A felületi veszteségeket a dielektromos függvény alapján is kiszámíthatjuk [65]. A mélység szerint változó energiaveszteségi függvény helyett találhatunk olyan *Monte Carlo* szimulációkat is, melyek egyszerű modellek alkalmazásával is jól közelítik a visszaszórt elektronok veszteségi spektrumát. Tőkési Károly a gerjesztések vizsgálatára a háromréteges modellt alkalmazta [13,100-102], melyben tömbi és felületi részekre osztotta fel a mintát, és ezeket a tartományokat a vákuumtól elkülönítette. Ilyen elméleti számítások bevezetése az *MC* szimulációba lehetővé teszi, hogy még olyan bonyolult elektronszerkezetű anyag, mint *Ag* felületi veszteségei is vizsgálhatók [13,100]. A számítások elsősorban tökéletesen sima, tiszta felületű homogén anyagok mért spektrumait képesek jól leírni.

### **I.F.3. Inhomogén minta mélységi összetételének mérése**

Az előzőek alapján látható, hogy a rugalmas csúcs viszonylag könnyen számítható. Konkol Attila és Menyhárd Miklós olyan *MC* modellt dolgoztak ki [97], amellyel *EPES* mélységi eloszlás mérést (mélységi feltérképezést) szimulált rétegszerkezetű *Mo/Si* mintában.

Ilyen mérésekben a mintát szokásosan  $Ar^+$  ionnyaláb porlasztja, amely a minta amorfizálását okozza. A porlasztás a felületi réteget folyamatosan távolítja el, és az aktuális felület a mérés során az idővel változik. A porlasztás hatásaként egy többkomponensű minta összetétele a felület közelében az idővel folytonosan változik. Az *EPES* mélységi feltérképezés a porlasztás során folytonosan méri a rugalmas csúcs intenzitást, amely a változó komponens eloszlás miatt változik. A rugalmas szórás erősen függ a  $Z$  rendszámtól, és emiatt egy *EPES* mélységi profilban minimumokat, maximumokat találhatunk. A  $Z$  függésen túlmenően érdekes lehet az *EPES* mélységi feltérképezés energiafüggése is. E munkában [97] a szerzők megmutatták, hogy inhomogén minták esetén a primer energia megválasztása meglepő eredményekre vezethet. Adott primer energiánál egy *EPES* mélységi profilírozás olyan felületi rétegben eredményezett maximumot, amikor a *Mo*-nak volt nagy a koncentrációja, míg más primer energiánál éppen fordítva, *Si* koncentráció maximumnál. Az *MC* modell a mintát rétegekre osztja fel, a rétegekben a koncentráció eloszlását bemeneti adatként kezeli. A számítás további bemeneti adatai a sűrűség adatok. A szimuláció a soron következő szórást a teljes rugalmas és rugalmatlan hatáskeresztmetszetek alapján határozta meg. Az energiaveszteségi függvény a számításban állandó volt.

*MC* modellükkel Menyhárd és munkatársai megmutatták, hogy bizonyos speciális esetekben az *EPES* mélységi profilírozás szokásos felületanalitikai eszközök mellett (*AES*, *XPS*) kiválóan alkalmazható nagyon vékony inhomogén rétegek vizsgálatára. Ennek a számításnak az előnye, hogy amikor olyan réteges szerkezetű, inhomogén mintákat írunk le, amelyben a koncentrációváltozások élesek, ezek a változások könnyebben követhetők az *EPES* módszerrel az elektron primer energiájának változtatásával, mint *AES* vagy *XPS* módszerekkel.

## II. SAJÁT EREDMÉNYEK

### II.A. Monte Carlo modell

Kidolgoztam egy *MC* modellt, amely képes több rétegből álló, rétegenként többkomponensű minták *EPES-REELS* spektrumának számítógépes szimulálására a *keV*-os energiatartományban előforduló hatások figyelembe vételével. A modell alapja az, hogy minden egyes elektront követünk a forrástól addig, míg a mintát el nem hagyja. Ha nagyszámú elektron transzportját írjuk le, kísérletileg mérhető fizikai paramétereket származtathatunk.

Főbb feltevéseim a következők:

- (1) A minta tökéletesen rendezetlen, melyben a kölcsönhatás helye véletlenszerű.
- (2) A kölcsönhatások pontszerűek.
- (3) A kölcsönhatások között az elektron egyenes pályán mozog.
- (4) A szórási statisztika mind rugalmas, mind rugalmatlan szórás esetén *Poisson* eloszlást követ.
- (5) Rugalmas szórás során a visszalökődés hatását és a fonongerjesztés figyelmen kívül hagyható.

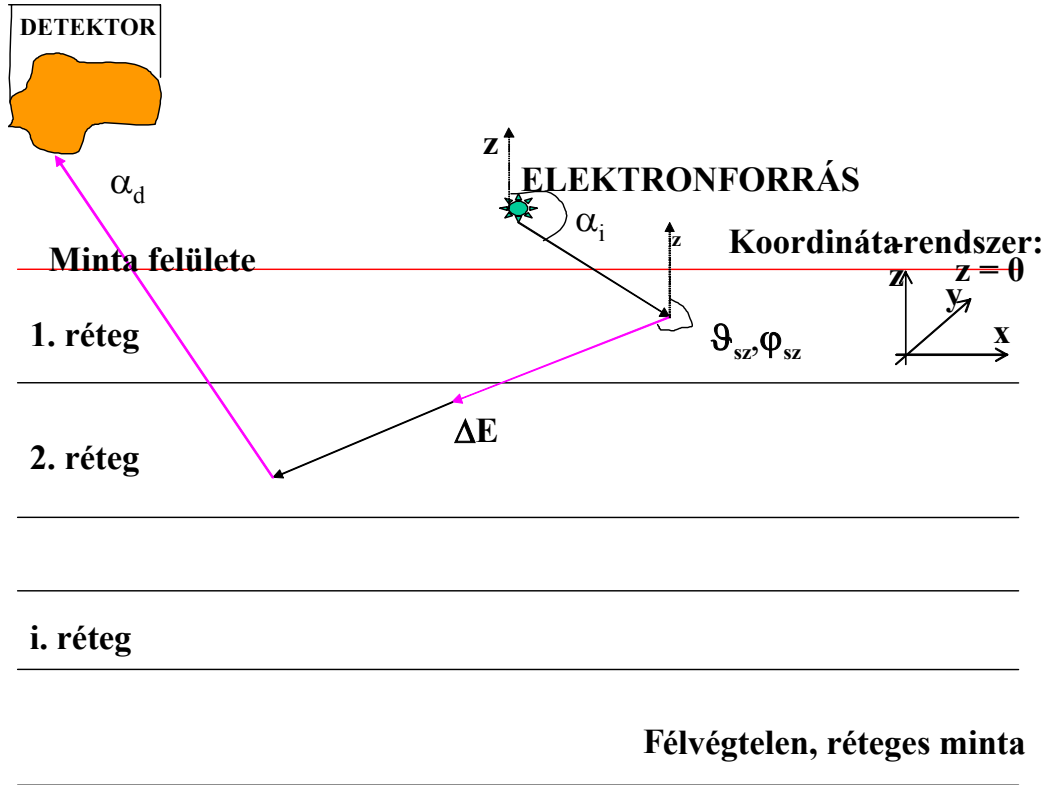
Az első feltétel jó közelítés mikrokristályos vagy amorf anyagmintákra. Még abban az esetben is, amikor nem rendezetlen minták mérése történik, szokásos *EPES-REELS* mérések ionporlasztást alkalmaznak, amely megváltoztatja, amorfizálja a minták felületközeli tartományát.

A második és a harmadik feltétel jelenti az elektron transzport lokális leírását, amely Vicanek munkája alapján [96] ekvivalens a dielektromos képpel.

A negyedik feltételben szereplő rugalmas és rugalmatlan kölcsönhatásokat független eseményekként írom le, és független események leírására *Poisson* statisztika a megfelelő.

Az 5. feltétel a *keV*-os energia tartományba alkalmazható.

Az ötödik ábra illusztrálja, hogy egy ilyen számítás a mintában mozgó elektron transzportját hogyan írja le.



5. ábra Monte Carlo szimulációban alkalmazott szimulációs elrendezés

A rugalmas szórás a differenciális hatáskeresztmetszet (EDCS) írja le. A rugalmas szórás gyakoriságát meghatározza az átlagos rugalmas szabad úthossz,  $\lambda_e$  (EMFP-Elastic Mean Free Path), amely a rugalmas hatáskeresztmetszettel és a minta sűrűségével kifejezhető [3]:

$$\lambda_e = \frac{1}{\rho \sigma_T}, \quad \sigma_T = \int \sin \vartheta \frac{d^2 \sigma}{d\vartheta d\varphi} d\vartheta d\varphi, \quad (II.A.1)$$

ahol  $\rho$  az atomi sűrűséget,  $\sigma_T$  pedig a teljes rugalmas hatáskeresztmetszet jelöli. A polár és az azimutális szórásszögeket véletlen számokkal generálom, mégpedig úgy, hogy a véletlen számokkal előállított azimutális szögek a  $[0, 2\pi]$  intervallumban folytonos eloszlást, a polár szögek pedig a rugalmas hatáskeresztmetszeteknek megfelelő eloszlást

követnek. A polár-, valamint az azimutális szögek a következő egyenletek alapján számíthatók ki:

$$[R]_0^1 * \sigma_T = \int_0^{\vartheta_{sz}} \frac{d\sigma_e}{d\vartheta} d\vartheta, \quad (II.A.2)$$

$$[R]_0^1 * 2\pi = \varphi_{sz}, \quad (II.A.3)$$

ahol  $[R]_0^1$  0 és 1 között egyenletes eloszlású véletlen szám sorozatot aktuális értéke,  $d\sigma_e/d\vartheta$  a rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszete,  $\sigma_T$  pedig a rugalmas szórás teljes hatáskeresztmetszete, amely rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszetéből a következőképpen számítható:

$$\sigma_T = \int_0^\pi \frac{d\sigma_e}{d\vartheta} d\vartheta. \quad (II.A.4)$$

A melléklet tartalmazza azt az algoritmust, amivel a számítógépes programban hatékonyan lehet adott eloszlású véletlenszám sorozatot generálni.

A rugalmatlan szórás során az elektron energiája csökken, az energiaveszteségeket az energiaveszteségi függvény írja le. Mivel a vizsgált  $keV$ -os tartományban a szórás során elvesztett energia az elektron saját energiájánál jóval kisebb,  $K(E, T)$   $E$ -függése elhanyagolható. Ezért az energiaveszteségi függvényt meghatározom  $E_0$  primer energiára, és a későbbiekben ez konstans:  $K(E, T) = K(E_0, T)$ . Jelölje  $E_{sz}$  azt az energiaveszteséget, melyet az  $E$  energiájú elektron egy adott rugalmatlan szóráskor veszít. Ezt az energiaveszteséget szintén véletlenszámokkal generálok, mégpedig úgy, hogy nagyszámú véletlen szám előállításakor a számított energiaveszteségek az energiaveszteségi függvény eloszlását kövessék.  $E_{sz}$  a következő képlet alapján számítható:

$$[R]_0^1 * \lambda = \int_0^{E_{sz}} K(E) dE. \quad (II.A.5)$$

$E_{sz}$  számítására szintén a mellékletben leírt algoritmust használtam.

A rugalmas és a rugalmatlan szórások között megtett utakat a szokásos statisztikus módszerrel számítom ki:

$$s_e = -\lambda_e \ln[R]_0^1 \quad \text{rugalmas szórás, és} \quad (II.A.6)$$

$$s_i = -\lambda_i \ln[R]_0^1, \quad \text{rugalmatlan szórás esetén.} \quad (II.A.7)$$

$s_e$  a rugalmas,  $s_i$  pedig a rugalmatlan szórás esetén megtett úthossz két egymást követő rugalmas (rugalmatlan) szórás között. A szimulációt addig folytatom, amíg az elektron a mintát el nem hagyja.

Rugalmas szórás előtt az elektron új  $\hat{n}_{k+1} = (\hat{x}_{k+1}, \hat{y}_{k+1}, \hat{z}_{k+1})$  haladási irányát polár koordináta-rendszerben meghatározzák a  $\vartheta_0$  polár- és a  $\varphi_0$  azimutális szögek. Descartes koordináta-rendszerben az elektron új iránya kifejezhető a  $\vartheta_k$  és a  $\varphi_k$  szórási szögekkel [2]:

$$\begin{pmatrix} \hat{x}_{k+1} \\ \hat{y}_{k+1} \\ \hat{z}_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_0 \cos \vartheta_0 & -\sin \varphi_0 & \cos \varphi_0 \sin \vartheta_0 \\ \sin \varphi_0 \cos \vartheta_0 & \cos \varphi_0 & \sin \varphi_0 \sin \vartheta_0 \\ -\sin \vartheta_0 & 0 & \cos \vartheta_0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \sin \vartheta_k \cos \varphi_k \\ \sin \vartheta_k \sin \varphi_k \\ \cos \vartheta_k \end{pmatrix}. \quad (II.A.8)$$

Homogén, többkomponensű minta esetén a rugalmas szórás különböző szórócentrumokon valósulhat meg. Míg az átlagos rugalmas szabad úthosszat egy komponens esetén a minta atomi sűrűsége és teljes hatáskeresztmetszete meghatározza - (II.A.1) egyenlet-, több komponens esetén

$$\frac{1}{\lambda_e} = \rho \sum_i c^i \sigma_T^i, \quad (II.A.9)$$

ahol  $c^i$  jelöli az  $i$ -dik komponens koncentrációját,  $\sigma_T^i$  pedig az  $i$ -dik komponens teljes rugalmas hatáskeresztmetszetét.

Az  $A$  komponens, amely  $c^A$  koncentrációval szerepel a mintában, az atomi szórásban  $\sigma_T^A$  szerint súlyozottan vesz részt, azaz  $A$  atommal való ütközés valószínűsége  $P_A$ :

$$P_A = \frac{c^A \sigma_T^A}{\sum_i c^i \sigma_T^i}. \quad (II.A.10)$$

A rugalmatlan szórás leírásakor energiaveszteségeket számítok. Homogén mintában a rugalmatlan szórást a veszteségi függvénnyel írom le, mely az adott összetételre jellemző. Többkomponensű minta veszteségi függvénye természetesen tükrözi a különböző komponensek megjelenését.

Réteges, az egyes rétegen belül homogén mintában egy rétegen belül mind a rugalmas, mind a rugalmatlan szórás leírása a homogén esetnek felel meg. Ha az elektron két rugalmas vagy rugalmatlan szórás között réteghatár(oka)t keresztez, a megtett utat a következőképpen számítom. Jelölje  $\tilde{s}$  a szabad úthosszakkal ( $\lambda$ -val) normált távolságokat (mind a rugalmas, mind a rugalmatlan esetben):

$$\tilde{s} \equiv \frac{s}{\lambda} = -\ln[R]_0^1. \quad (II.A.11)$$

Az  $[R]_0^1$  véletlenszámmal kisorsolt, normált úthosszat az elektron az egyes rétegekben megtett távolságok összegeként teszi meg a következőképp:

$$\sum_j \tilde{s}_j = \sum_j \frac{s_j}{\lambda_j}, \quad (II.A.12)$$

ahol  $s_j$  jelöli az elektron  $j$ -dik rétegben megtett útját. Ez azt jelenti, hogy a modellben feltételezem, hogy rétegváltáskor a  $\lambda$  értékek hirtelen (ugrásszerűen) változnak meg.

A rétegváltások kezelése természetesen másképp is leírható [98,103-104]. A (II.11-II.12) egyenletekkel leírt módszer a rétegeken belül az úthosszak kiszámítására egy lehetséges, egyszerű formalizmust biztosított.

Réteges mintában a rugalmatlan szórás leíráshoz minden egyes  $j$ -dik rétegben szükségünk van a  $K_j(E)$  energiaveszteségi függvényre.

Összefoglalásul az elektron transzport szimulációja abból áll, hogy nagyszámú elektronra egyenként kiszámolom a két szórás között megtett távolságot az aktuális



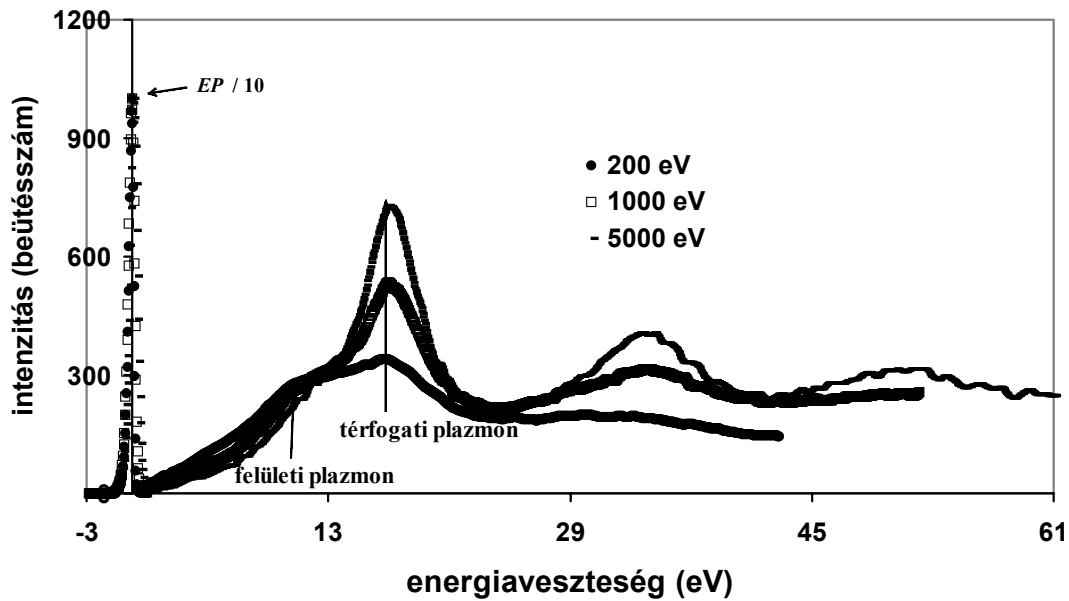
véletlenszám érték és a szabad úthosszak segítségével, a (II.A.6)-(II.A.7) egyenletek alkalmazásával. Rugalmas szórásnál szórási szögeket, rugalmatlan szórásnál energiaveszteségeket számítok. Az elektron mozgását addig követem, amíg az elektron el nem nyelődik vagy a mintát el nem hagyja. Végül megvizsgálom, hogy a mintát elhagyó elektronok detektálhatók-e, az észlelt elektronok különböző jellemzői (energia csatornák, szög, szórásszám, stb.) alapján statisztikát készítek.

## II.B. Si, Ge és Sn EPES-REELS spektrumok szimulációja

Mind a rugalmas, mind a rugalmatlan szórás függ a mintától és a mérési feltételektől. Különböző berendezésekkel, illetve ugyanazon berendezéssel különböző paraméterekkel felvett visszaszórt spektrumok intenzitásukban és jellegükben erősen különböznek. Lássuk, sikerül-e ezeket a jelentősen különböző spektrumokat módszeremmel szimulálni.

Mért *EPES-REELS* spektrumokat kaptam kiértékelésre. A spektrumok a rugalmas csúcsot és az azt megelőző kis, kb. 50 *eV*-os veszteségi részt tartalmazzák. A méréseket Debrecenben, az ATOMKI-ban az *ESA 31* spektrométerrel [16] Tóth József, valamint Budapesten, az MFA-ban a *DESA 100* (Staib) spektrométerrel [15] Menyhárd Miklós végezte. A debreceni mérésekben a beeső elektronnyaláb a felület normálisával 50°-ot zárt be, a detektálás szöge pedig a felületre merőleges, a normálisához képest kb. 0-5° detektornyílással. A budapesti mérésekben két elektronforrást használtak. Az egyikben a beeső sugár a felület normálisához képest 0°-ban, a másikban 55°-ban érte a mintát. A *DESA 100* spektrométer detektornyílása a felület normálisához képesti 19-31°-os kúpszög. Az *ESA 31* spektrométer energiafelbontása 50-150 *meV*, a *DESA 100* spektrométeré jóval nagyobb, 2.2 *eV*.

*polySi*, *amorfGe*, és *mikrokristályos Sn* mintákon, különböző (0.2 *keV*, 0.5 *keV*, 1.0 *keV*, 1.5 *keV*, 2.0 *keV*, 3.0 *keV* és 5.0 *keV*) primer elektron energiákon végzett debreceni, valamint budapesti méréseinek szimulációit végeztem el. A 6. ábrán három mért debreceni *Si* spektrumot láthatunk.



6. ábra ESA 31 elektron spektrométeren mért 200 eV-os, 1000 eV-os és 5000 eV-os Si kísérleti spektrumok

Ahhoz, hogy a spektrumokat össze tudjuk hasonlítani, a rugalmas csúcsokat azonos nagyságúra normáltam. Az egyes normálási tényezőkkel természetesen a teljes spektrumokat megszoroztam, hogy a spektrumok alakja ne változzon. Az ábrán a rugalmas csúcsokat is feltüntettem, eredeti intenzitásuk egytizedével.

Az egyszeres felületi plazmonvesztés mindhárom spektrumban megkülönböztethető az egyszeres tömbi plazmongerjesztésektől. Jól látható, hogy az elvárásnak megfelelően a felületi plazmoncsúcs a tömbi plazmonhoz képest közelítőleg az  $\omega_S = \omega_B / \sqrt{2}$  helyen van, ahol  $\omega_S$  a felületi plazmonfrekvenciát,  $\omega_B$  a tömbi plazmonfrekvenciát jelöli. Minél nagyobb az elektron primer energiája, a felületi gerjesztés relatív intenzitása annél kisebb, hiszen az energia növekedtével az *IMFP* is megnő, ezért az elektronok a minta felületközeli tartományában ritkábban vesznek részt gerjesztési folyamatokban.

### II.B.1. Veszteségi spektrum szimulációja

A rugalmatlan szórás leírásakor az elektron irányváltozását elhanyagolom. A plazmongerjesztések, valamint a sávok közti és sávon belüli gerjesztések kis impulzusváltozást okoznak. Nagy impulzusváltozást az atomok belső elektronhéjának gerjesztése idéz elő, de ilyen típusú kölcsönhatások a *keV*-os tartományban ritkán fordulnak elő más típusú gerjesztésekhez képest. A felületi és a térfogati gerjesztéseket

független eseményekként írom le, felületi-, illetve térfogati energiaveszteségi függvényekkel.

Mivel felületi gerjesztések legnagyobb valószínűséggel a felülethez közeli tartományban történnek, a 7. ábrának megfelelően egy felületi réteget definiálok, melyben térfogati gerjesztés nem történik, és a rugalmas szórástól eltekintek. A rugalmas szórás elhanyagolása azon alapszik, hogy a felületi rétegen belül számítom mind a mintán belül, mind a vákuum oldalon történt felületi gerjesztéseket. A vákuumban rugalmas szórás nem történik. A mintán belül a szimulált mérési energiáknak megfelelően a felületi gerjesztések néhány atomsorban történnek, melyen belül a rugalmas szórást elhanyagoltam.



**7. ábra** A minta tömbi és felületi tartományokra osztása a Monte Carlo modellben

Ezzel a modellel az *ESA 31* és a *DESA 100* spektrométerekkel végzett mérések szimulációjakor a 2.a-2.b ábrán látott tömbi és felületi gerjesztések valószínűségének mélység szerinti változását konstans felületi és térfogati energiaveszteségi függvényekkel helyettesítettem.

A felületi és a térfogati veszteségi függvényeket Drude típusú függvények összegeként állítom elő:

$$K(E, T) = \sum_{j=1}^n A_j D(\Gamma_j, \omega_j, \omega). \quad (II.B.1.1)$$

A rugalmas szórás (melyet a tömbi tartományban számítok) a NIST 64 adatbázisból [105] vett rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszeti adatokkal, a térfogati veszteségek intenzitását pedig a NIST 71 *IMFP* adatbázisból [57-58] vett *IMFP* adatokkal írtam le. A mérések szimulálásakor a felületi gerjesztések intenzitása illesztési paraméter volt, melyet két paraméterrel változtattam. Bevezettem egy felületi *IMFP*-t, mellyel a szimulációkban adott vastagságú felületi rétegen belül írtam le a felületi gerjesztések gyakoriságát. E két szabad paraméter (vegyis nem fizikai paraméterek) együttes megválasztásával változtattam a felületi gerjesztés intenzitását. A felületi réteg alatt, a térfogati tartományban a felületi gerjesztés valószínűségét elhanyagoltam, nullának vettem.

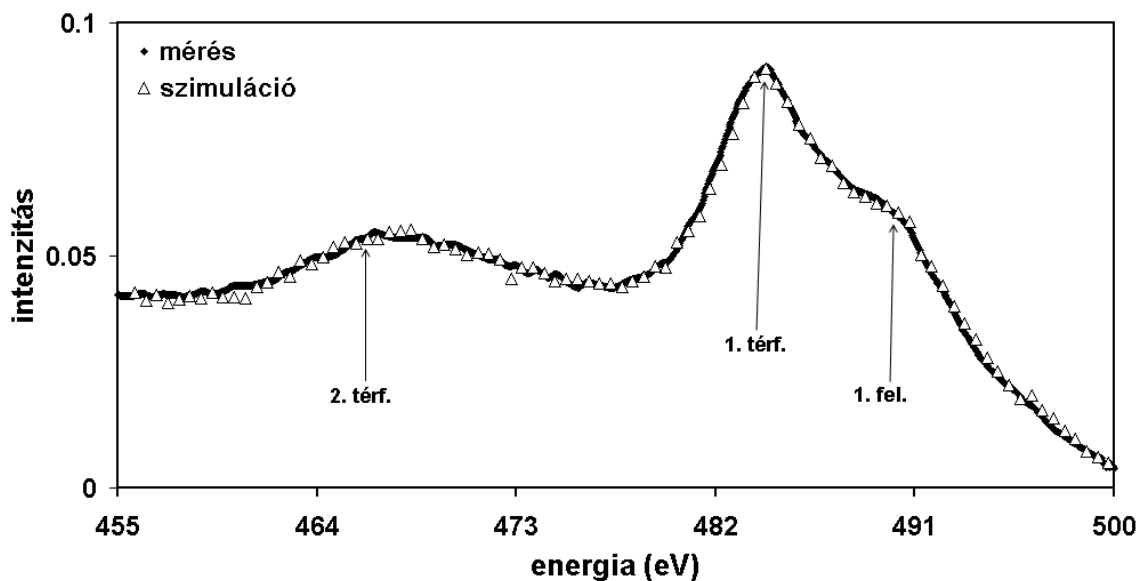
Olyan *Monte Carlo* szimulációs eljárásokkal szemben, melyek a felületi gerjesztés leírását a mintára korlátozták [13,106-110], modellem a minta-, valamint a vákuum-oldalon történt felületi gerjesztéseket a felületi rétegen belül számítja.

## II.B.2. A veszteségi függvény meghatározása

A veszteségi függvény elvileg a nulla energiavesztéstől tart a primer energiáig, hiszen ha csekély valószínűséggel is, de minden energián van energiavesztés. Azonban az is világos, hogy a szimulált energiatartományon kívüli veszteségek pontos energiája nem érdekes, csak teljes intenzitásuk. Ezért a szimulált tartományon kívüli veszteségeket integrálok és így veszem figyelembe. A számításban ezt a farokrészt, mely a spektrumban nem mért nagy energiavesztéseket jelöli, egy lépcsőfüggvény helyettesíti. A felületi veszteségi függvényt egy egyszerű Drude-típusú függvény írja le. A mérések szimulációjakor kiválasztottam egy tetszőleges mérést (pl. 1.0 keV-os debreceni mérést), és próbálgatással addig változtattam a Drude függvényben levő szabad paramétereket, a farokrészt és a felületi gerjesztés intenzitását, míg a szimulált veszteségi spektrum jól nem egyezett a mérttel. A származtatott veszteségi függvények alkalmazhatók a más körülmények (szög és energia) között mért spektrumok szimulációjára. Akkor érem el célokat, ha egy veszteségi függvénnyel az összes rendelkezésre álló mérési eredményt illeszteni tudom. Az ilyen módon, kísérletileg megtalált energiavesztési függvénnyel közelítem a mintára jellemző energiavesztési függvényt. Lássuk, milyen eredményre

vezetett ez a *polySi*, az *amorfGe* és a mikrokristályos *Sn* mintákon mért veszteségi spektrumok szimulációjakor. A szimulált kísérleti spektrumok közel 50 eV-os energiaveszteségi részt tartalmaztak, ezért a méréseknek megfelelő szimulációkat is ezen a tartományon végeztem.

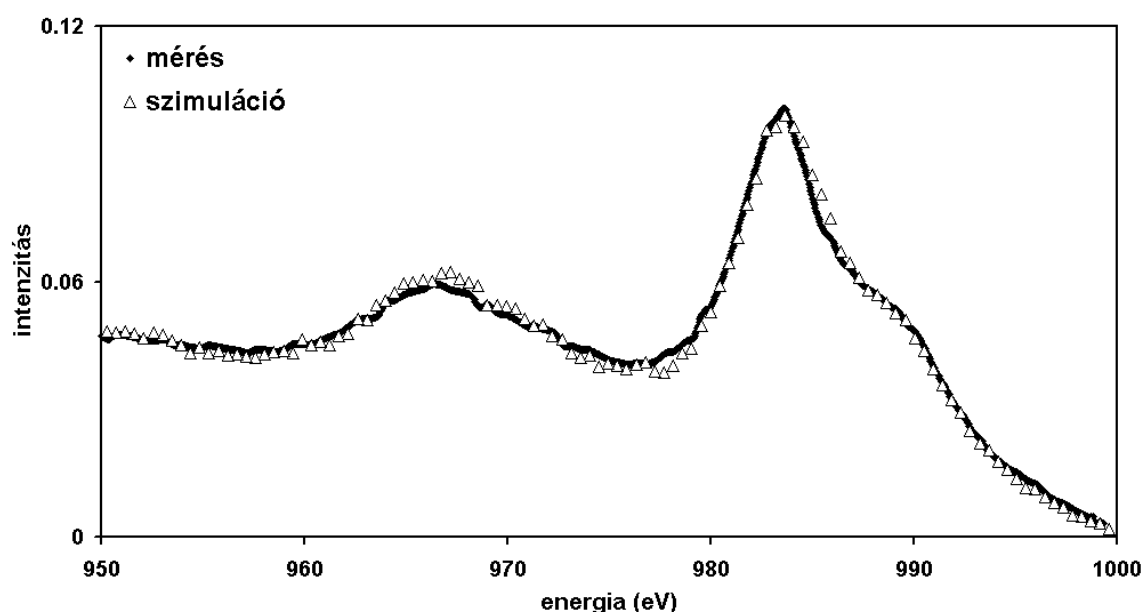
### II.B.3. Si szimuláció



8.a ábra ESA 31 elektron spektrométeren mért *polySi* 0.5 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

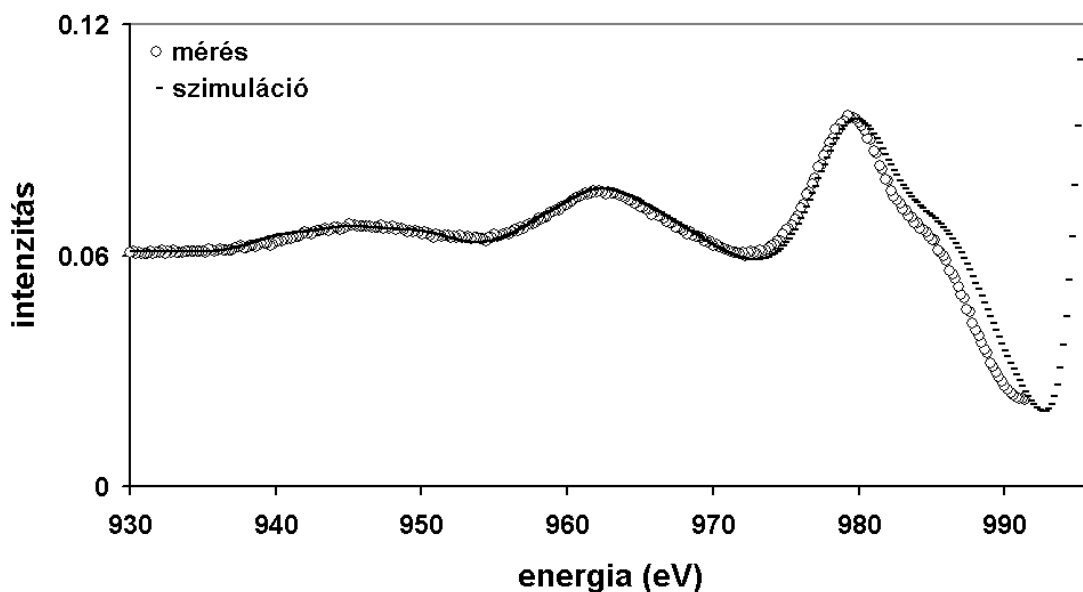
A 8.a. ábrán *polySi* minta debreceni 0.5 keV-os mért spektruma és az ennek megfelelő szimuláció látható. A szimulációban  $10^8$  db elektron pályáját számítottam, ezért az eredmény statisztikai bizonytalanságot tartalmaz. A mérés és a szimuláció ábrázolásakor a rugalmas csúcsokat egyforma nagyságúra (1-re) normáltam. A mért adatok 0.05 eV-onként, a szimulációban a számított értékek 0.5 eV-onként követik egymást. Az ESA 31 spektrométerrel mért rugalmas csúcs szélessége (0.45 eV) kisebb volt, mint a szimulációban az energiafelbontás, így a rugalmas csúcsot saját energiánál delta-függvénnyel közelítettem. Az ábra a rugalmas csúcsokat nem mutatja, melynek energiája 501.3 eV. Az első felületi plazmonveszteség energiája 490 eV-nál, a rugalmas csúcshoz képest 11.3 eV-nál, az első térfogati plazmonveszteség energiája 484.3 eV-nál, a rugalmas csúcshoz képest 17 eV-nál látható. A kétszeres térfogati plazmonveszteség energiája 467.3 eV-nál látható. A spektrum a mért tartományban a két-, három- és négyszeres felületi gerjesztéseket is tartalmazza, de ezeket nem látjuk, intenzitásuk már csekély. Térfogati és

felületi gerjesztések összegéből egyedül az egyszeres térfogati és az egyszeres felületi gerjesztések összege látszik a spektrumban, de ez is csak kis mértékben különböztethető meg a statisztikai zajtól. A mérés és a szimuláció illeszkedése itt kiváló. A mért és a szimulált első térfogati és felületi plazmoncsúcsok, plazmonvölgyek jól illeszkednek. A második térfogati plazmonvölgnél látható kis eltérés a mérés és a szimuláció között, a teljes tartományra elmondható azonban, hogy a mérési hibán belül a szimuláció kiválóan illeszkedik a mért spektrumhoz.



**8.b ábra** ESA 31 elektron spektrométeren mért polySi 1.0 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

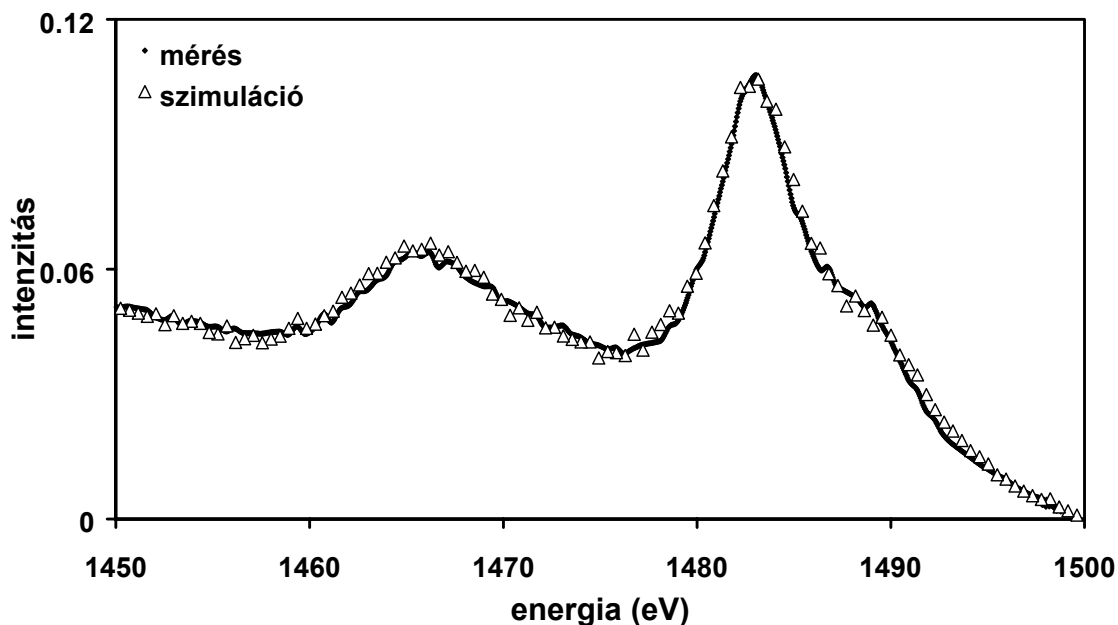
A 8.b. ábrán ugyanazon a *polySi* mintán látunk 1.0 keV-os debreceni mérést. Az ábrán nem látszó rugalmas csúcsok 1000.6 eV energiánál vannak. Az első térfogati és az első felületi plazmonok szimulációja tökéletesen illeszkedik a méréshez. A második térfogati plazmoncsúcsnál és plazmonvölgnél kis eltérések láthatók, melyek azonban szintén a mérési bizonytalanságon belül vannak. A szimuláció és a mérés illeszkedése az egész energiatartományon megfelelő.



**8.c. ábra** DESA 100 elektron spektrométeren mért polySi 1.0 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

A 8.c. ábrán a *polySi* minta budapesti, a DESA 100 spektrométerrel végzett 1.0 keV-es mérése és szimulációja látható. A mérés nagyobb, 70 eV-os tartományon készült, a rugalmas csúcs energiája 1001.3 eV. Az ábrán jól láthatók az egyszeres, kétszeres és háromszoros térfogati plazmonveszteségek, a mérés és a szimuláció ezeken a helyeken jól illeszkednek. Jelentős eltérés a szimuláció és a mérés közt a rugalmas csúcs és az első térfogati plazmonveszteség között látható. Ezen a tartományon a szimuláció úgy néz ki, mintha a mérést eltolnánk a rugalmas csúcs irányába. A DESA 100 spektrométer energia felbontása változtatható, mely ebben a mérésben jóval nagyobb (2.2 eV) volt, mint a megfelelő ESA 31 mérésben. A rugalmas csúcs mért félérték szélessége sokkal nagyobb, mint a szimulációban használt energia felbontás, ezért a DESA 100 átviteli függvényének jelentős hatása van a mért spektrumban. Ezt a hatást Gauss-konvolúcióval modelleztem, mely az ábrán látható módon nem eredményezett megfelelő egyezést a rugalmas csúcs környezetében. Ebben a szimulációban ugyanazokat a tömbi és felületi energiaveszteségi függvényeket használtam, mint a 8.a és a 8.b. ábrán.

Menyhárd Miklós és Sulyok Attila későbbi munkájukban [111] a DESA 100 spektrométer átviteli függvény hatását a mérésben nem Gauss konvolúcióval, hanem a mért rugalmas csúcs alapján precízebb eljárással modellezte, és ezzel a módszerrel a szimuláció a mért spektrummal a rugalmas csúcs közvetlen környezetében is kiválóan illeszkedett.



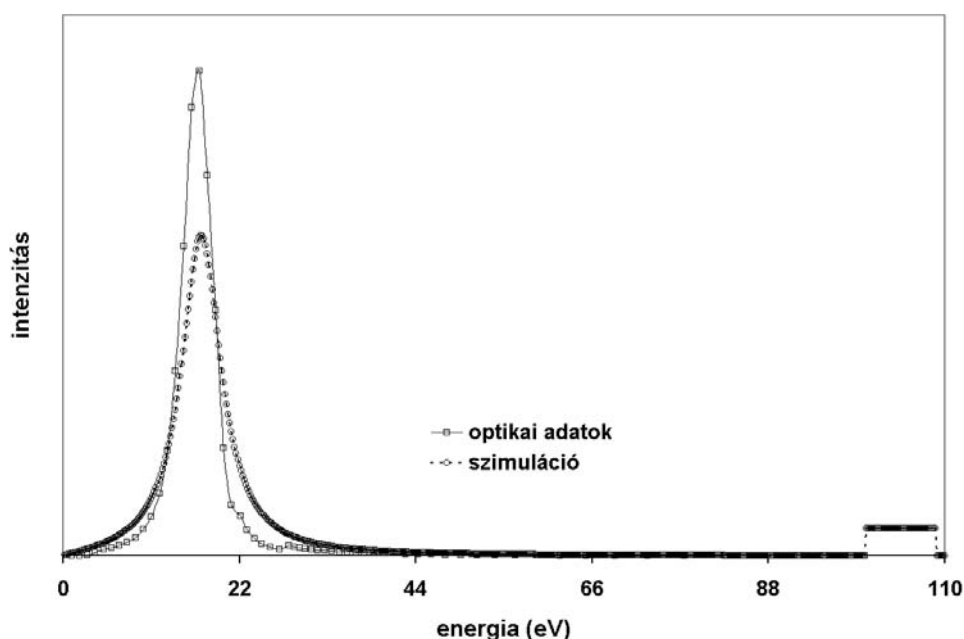
8.d. ábra ESA 31 elektron spektrométeren mért *polySi* 1.5 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

A 8.d. ábrán *polySi* (debreceni minta) debreceni mérése látható 1.5 keV-on. Az első, a második térfogati plazmoncsúcsok, a második térfogati plazmonvölgy szimulációja jól illeszkedik a mérési spektrumhoz. A rugalmas csúcs közvetlen környezetében is megfelelő az illeszkedés. A szimuláció és a mérési adatok között jelentősebb eltérések az első felületi plazmonnál és az első térfogati plazmonvölgynél találhatók, de ezeket figyelembe véve is a szimuláció jól illeszkedik a méréshez.

Összegzésül a 8.a.-8.b. és a 8.d. ábra alapján látható, hogy az debreceni spektrumokat modellemmel jól tudtam szimulálni. A 8.c. ábra alapján látható, hogy a *polySi* minta budapesti mérésének 1.0 keV-os szimulációja is jól illeszkedik a méréshez, a rugalmas csúcs környezetétől eltekintve.

A 9. ábrán látható az a térfogati veszteségi függvény, melyet eljárásommal határoztam meg a *polySi* spektrumok szimulálása során, továbbá a *Si* optikai adatok alapján kiszámított veszteségi függvény is.





9. ábra Si térfogati energiaveszteségi függvénye optikai adatok alapján és a Monte Carlo szimulációban

Látható, hogy az optikai adatokból számított veszteségi függvény keskenyebb. Ezt azzal magyarázhatjuk, hogy az optikai mérésekkel szemben az elektron szórásban a diszperziós reláció  $q \neq 0$  része nem hagyható el, és ezért a plazmongerjesztés alakja szélesebb lesz (ld. (I.C.8) egyenlet). Ezen kívül egy bombázott minta térfogati tartományában hibahelyek keletkezhetnek, ami a veszteségi csúcsok alakját szintén megváltoztatja [112].

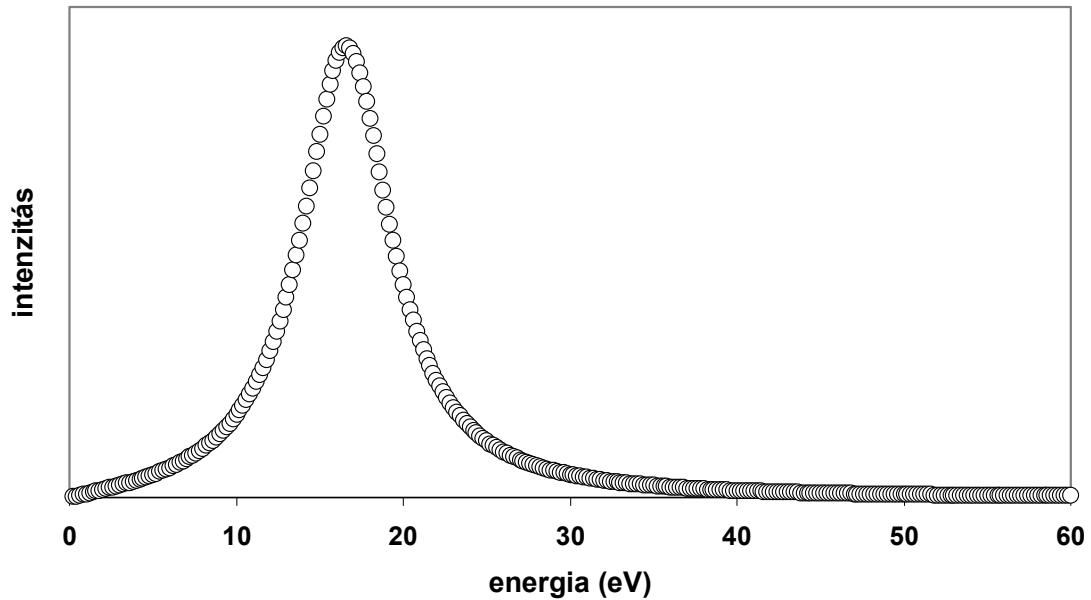
A debreceni és a budapesti *polySi* mérések különböző mérési körülményeit (*ESA 31* és *DESA 100* spektrométerek) ugyanazokkal a tömbi- és felületi energiaveszteségi függvénnyel tudtam szimulálni. Ez azt mutatja, hogy az energiaveszteségi függvénynek valós fizikai jelentése van. Az *MC* modell képes tényleges mérések tömbi- és felületi veszteségeinek leírására.

#### II.B.4. Ge szimuláció

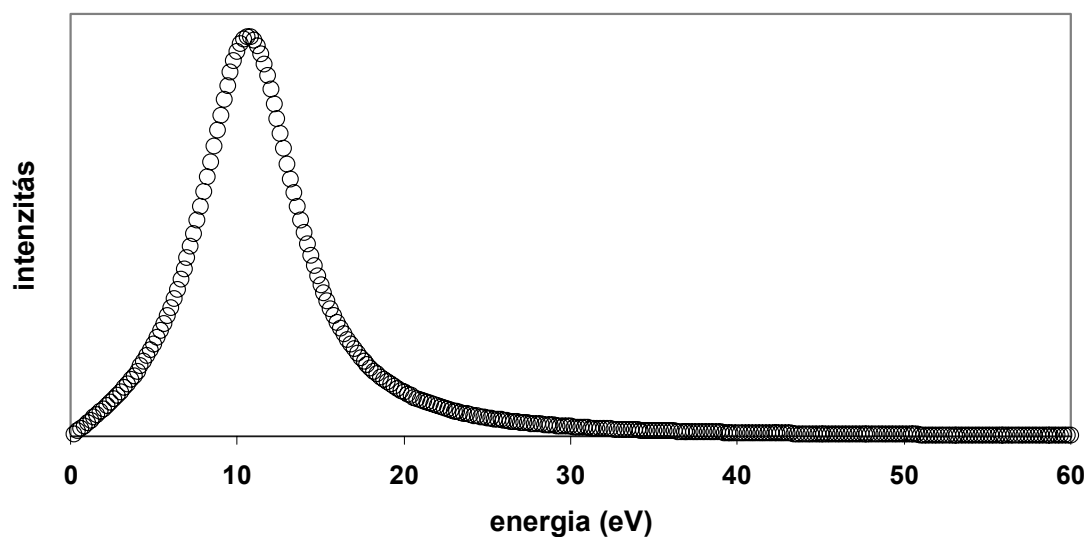
*amorfGe* minta mért debreceni spektrumait a *polySi* mintához teljesen egyező módon szimuláltam. A rugalmas hatáskeresztmetszeti adatokat a NIST 64 adatbázisból [105] vettem, a térfogati veszteségek intenzitását a NIST 71 adatbázis *IMFP* adatai alapján határoztam meg [57], a felületi veszteségek intenzitása pedig illesztési paraméter volt. A térfogati és a felületi veszteségi függvények alakját addig változtattam, míg az összes

primer energián az illesztéseket ugyanazzal a térfogati, és felületi veszteségi függvényekkel tudtam végrehajtani.

Az *amorfGe* szimulációban alkalmazott tömbi és felületi veszteségi függvények:

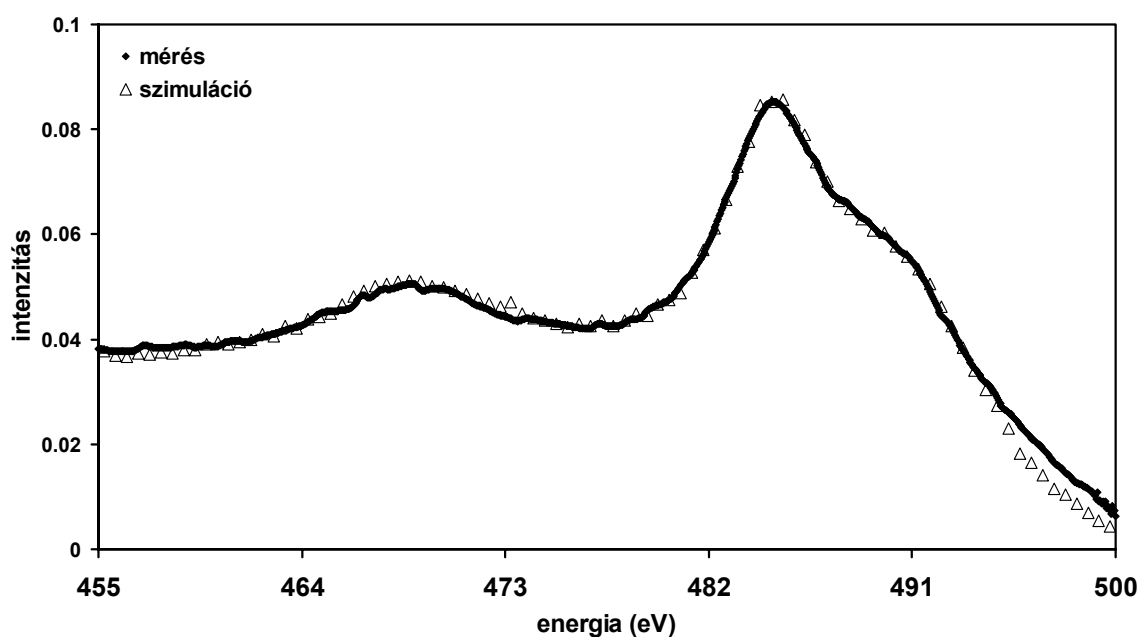


10.a. ábra *amorfGe* minta MC szimulációban használt térfogati energiaveszteségi függvénye



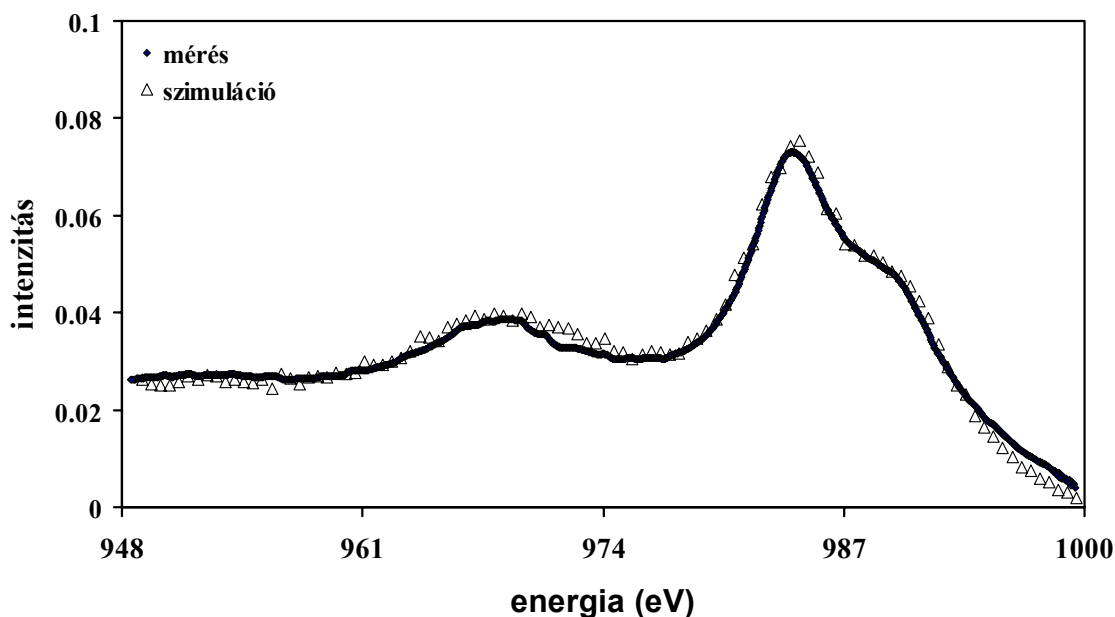
10.b. ábra *amorfGe* minta MC szimulációban használt felületi energiaveszteségi függvény

A 10.c.-10.e. ábrán látható három primer elektronenergián végzett szimulációs eredmény.



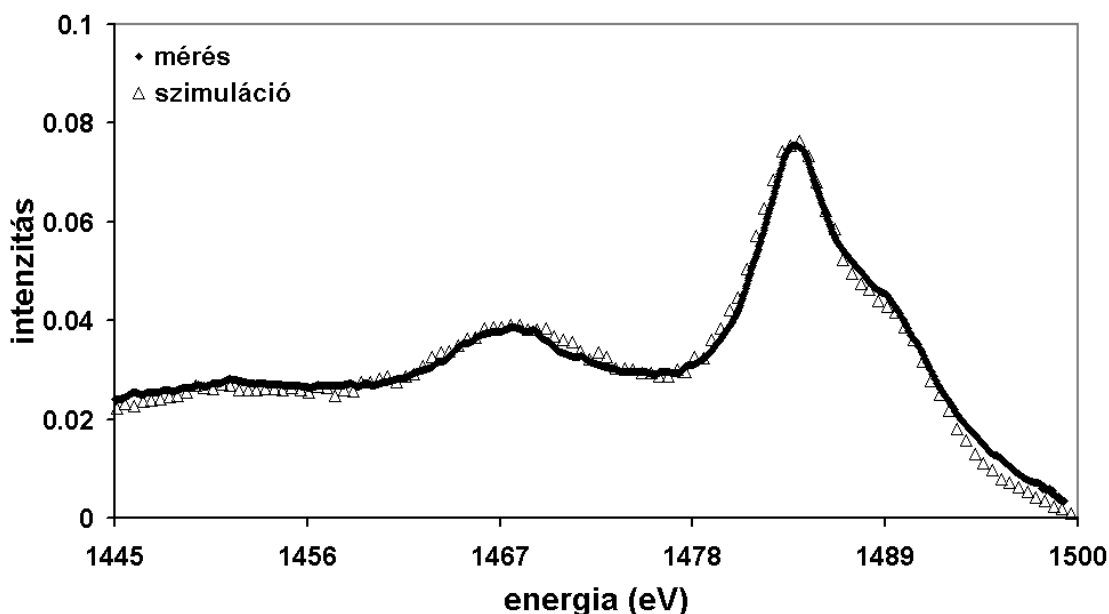
10.c. ábra ESA 31 elektron spektrométeren mért amorfGe 0.5 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

A 10.c. ábrán *amorfGe* minta 0.5 keV-os debreceni, ESA 31 spektrométerrel végzett mérése és megfelelő szimulációja látható. A rugalmas csúcsok 502.3 eV-nál vannak, melyeket az ábra nem tartalmaz. Az első térfogati és az első felületi plazmonok jól illeszkednek, eltérést a rugalmas csúcs közvetlen közelében láthatunk. Ezek az eltérések azonban a mérési bizonytalansággal összemérhetők, az egyezés megfelelő.



10.d. ábra ESA 31 elektron spektrométeren mért amorfGe 1.0 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

A 10.d. ábrán *amorfGe* 1.0 keV-os debreceni mérést és a megfelelő szimulációt láthatjuk. A rugalmas csúcsok energiája 1000.15 eV, amiket az ábra nem tartalmaz. A statisztikai hiba az előző ábrákhoz képest nagyobb, a szimulációt kevesebb ( $3 \cdot 10^7$  db) elektronpálya számításával végeztem. Ettől függetlenül az első térfogati és felületi plazmoncsúcsok, a második plazmoncsúcs, valamint az első térfogati és első felületi veszteségek összege jól illeszkednek. Eltérés a számítások és a mérések között a rugalmas csúcs közvetlen közelében látható. Ezen kívül az illeszkedés megfelelő.



**10.e. ábra** ESA 31 elektron spektrométeren mért *amorfGe* 1.5 keV spektrum és annak megfelelő szimuláció

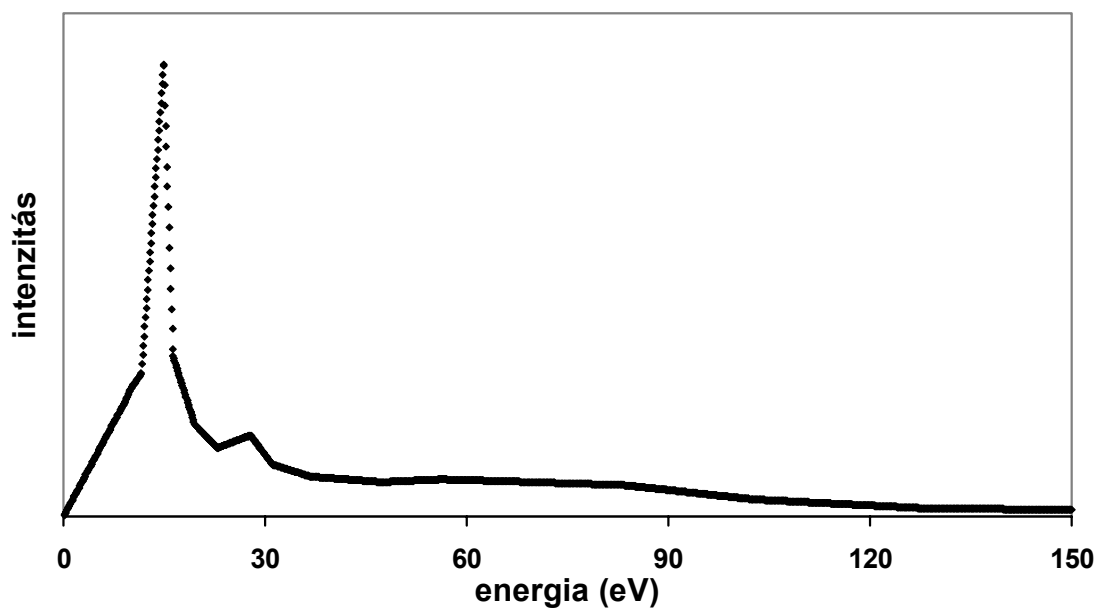
A 10.e. ábrán *amorfGe* 1.5 keV-os debreceni, ESA 31 spektrométerrel végzett mérése és a megfelelő szimuláció látható. Az első térfogati és felületi plazmoncsúcsok, a második térfogati plazmoncsúcs szimulációja jól illeszkedik a méréshez. Különbségek a rugalmas csúcs közvetlen közelében, valamint 1456 eV alatt láthatók. A rugalmas csúcs közelében látható eltérésen kívül az illeszkedés megfelelő.

A 10.c.-10.e. ábrák mindegyikén látszódik a szimulációk szisztematikus eltérése a mérésektől a rugalmas csúcs közvetlen közelében. Ennek lehetséges oka, hogy egyetlen megfelelő Drude alakú veszteségi függvényt használtam a felületi, illetve a térfogati veszteségek leírására. A rugalmas csúcs közvetlen környezetében valószínűleg sávok közti vagy sávon belüli gerjesztések hatása látható, amit a Drude-függvények nem írnak le.

Összefoglalásul az *ESA 31* spektrométeren végzett debreceni *amorfGe* mérések a megfelelő szimulációkhoz a rugalmas csúcs közvetlen közelében látható eltérésektől eltekintve nagyon jól illeszkednek.

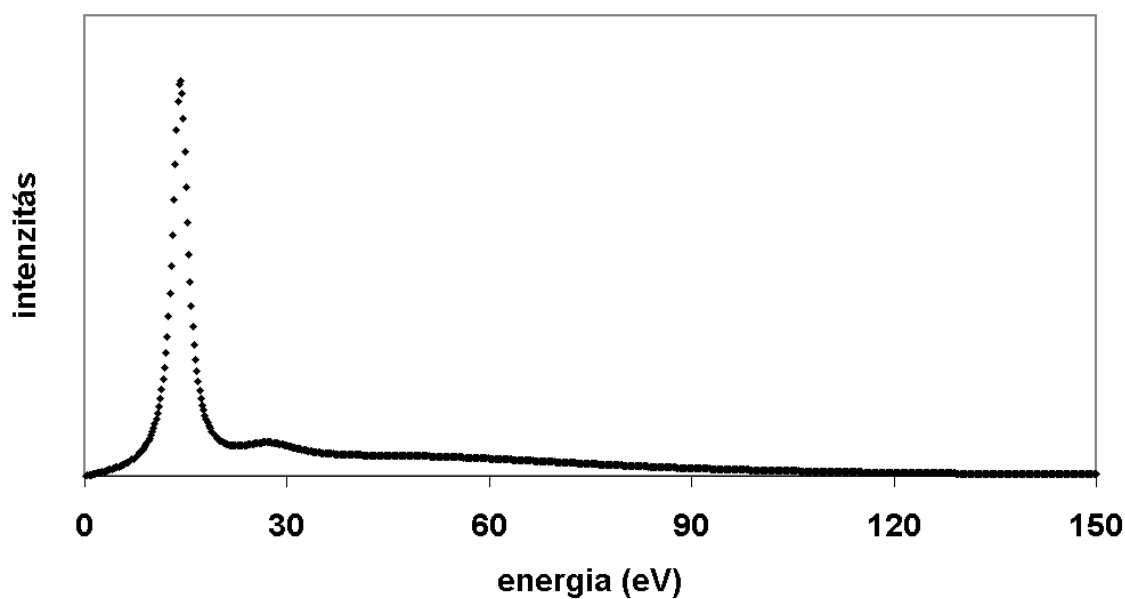
## II.B.5.Sn szimuláció

Mikrokristályos *Sn* végzett debreceni méréseket szimuláltam a fentiekben bemutatott módszerrel. A 11.a. ábrán *Sn* optikai adatok [44] alapján számított veszteségi függvény látható.



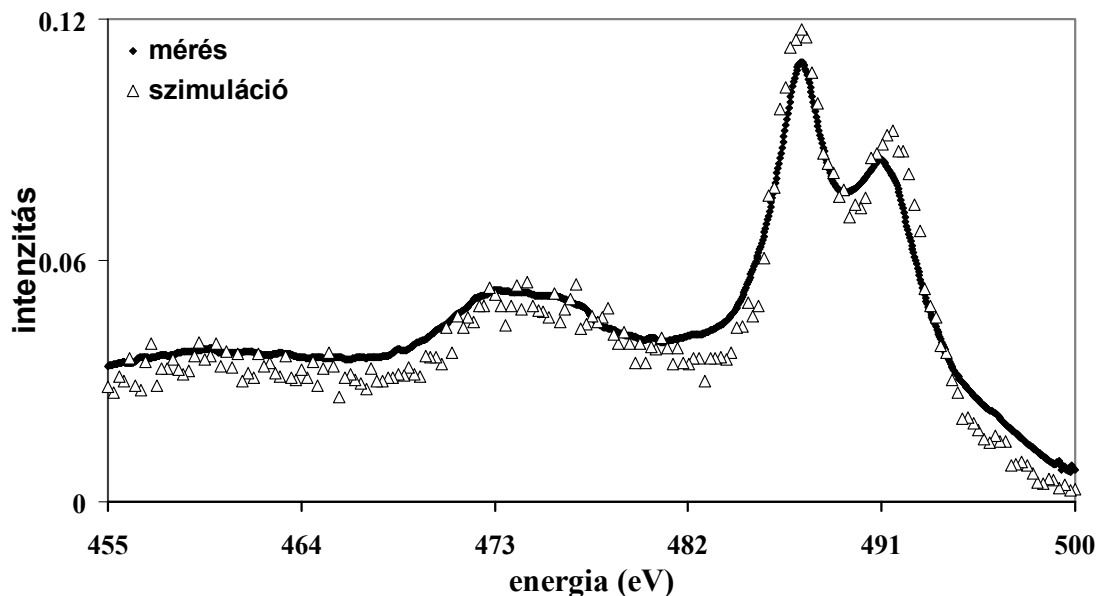
11.a. ábra *Sn* térfogati energiaveszteségi függvénye optikai adatok alapján

Az *Sn* debreceni spektrumok szimulálásakor a térfogati energiaveszteségi függvény:



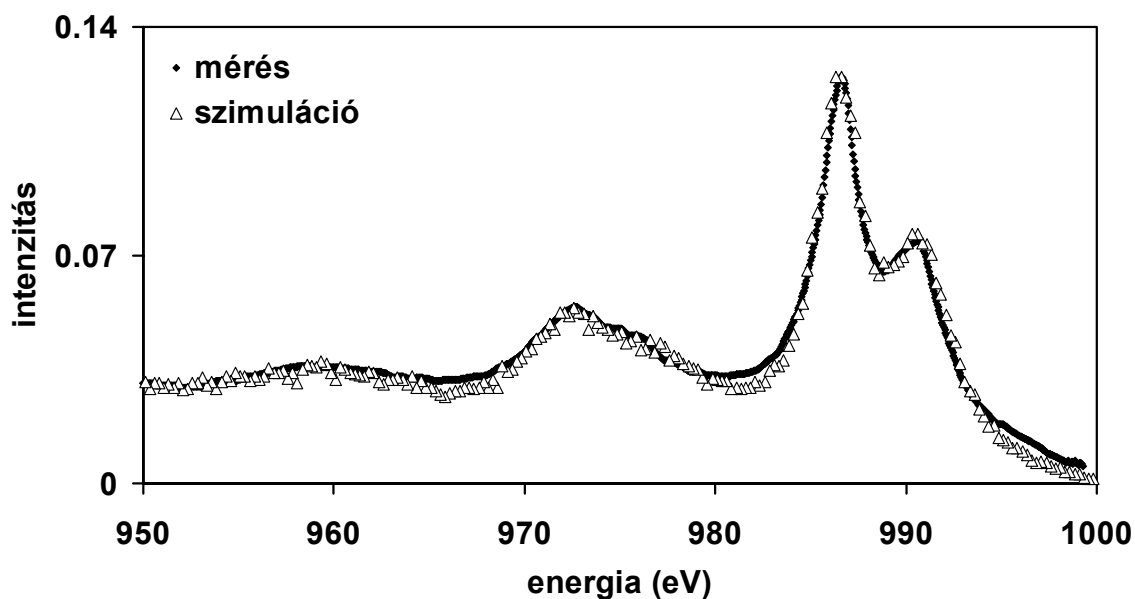
11.b. ábra *Sn* térfogati energiaveszteségi függvénye a Monte Carlo szimulációban

A 11.c.-11.e. ábrákon *Sn* méréseket és szimulációit mutatom be 500, 1000 és 1500 *eV* primer elektron energiákon.



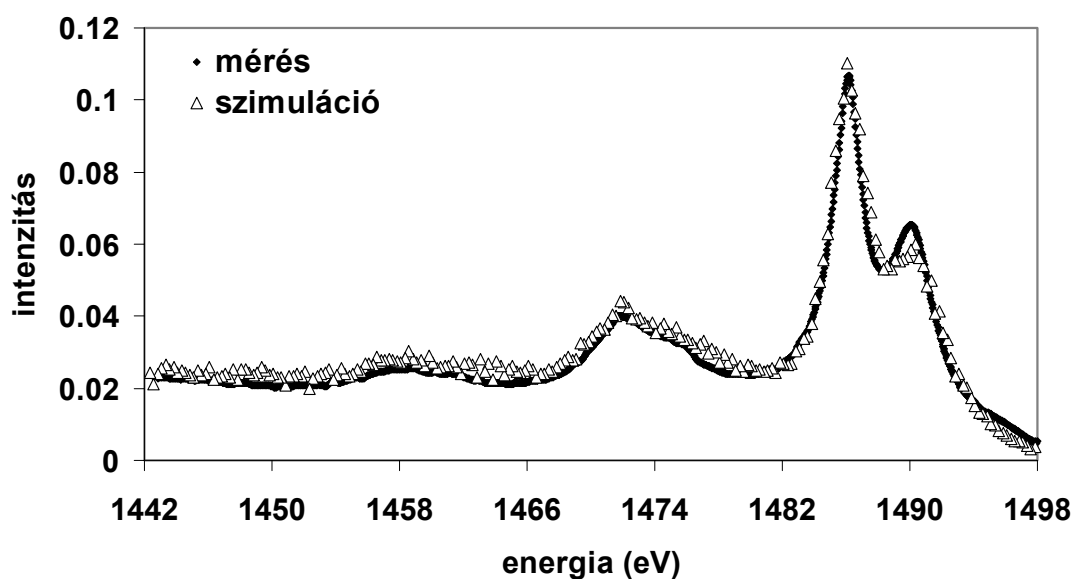
**11.c. ábra** mikrokristályos *Sn* ESA 31 elektron spektrométeren mért 0.5 keV-os spektruma és az annak megfelelő szimuláció

A 11.c. ábrán *Sn* minta ESA 31 spektrométerrel 0.5 keV-on mért debreceni spektruma és az annak megfelelő szimuláció látható. A rugalmas csúcs 502.3 *eV*-nál van, melyet az ábra nem tartalmaz. A rugalmas csúcs közvetlen közelében a szimuláció a méréshez képest alacsonyabb értékeket mutat. 488 *eV*-nál és 484 *eV*-nál az első és a második veszteségi csúcsok szimulációinak értéke nagyobb, mint a mérésé, a veszteségi völgyeké pedig 487 *eV*-on és 483 *eV*-on kisebbek. 455 *eV* és 483 *eV* között a szimuláció értéke kisebb, mint a mérésé, de ezen a tartományon az eltérés szisztematikus, a szimuláció és a mérés intenzitása szorzófaktorban tér el egymástól. A szimuláció és a mérés illeszkedése a *polySi* és az *amorfGe* minták szimulációjához képest rosszabb, de a szimulációval kapott görbe menete az egész mért tartományon jól követi a kísérleti görbét.



11.d. ábra mikrokristályos Sn ESA 31 elektron spektrométeren mért 1.0 keV-os spektruma és az annak megfelelő szimuláció

A 11.d. ábrán Sn minta debreceni 1.0 keV-os mérése és az ennek megfelelő szimuláció látható. A rugalmas csúcsok 1000.15 eV-nál vannak, melyeket az ábra nem tartalmaz. A rugalmas csúcs közvetlen környezetében a szimuláció a méréshez képest alacsonyabb értéket mutat. A veszteségi csúcsok szimulációja jól illeszkedik a méréshez. A második és a harmadik völgynél a szimuláció alacsonyabb értéket mutat, mint a mérés. A szimuláció és a mérés közötti eltérésekkel együtt az illeszkedés megfelelő.



11.e. ábra mikrokristályos Sn ESA 31 elektron spektrométeren mért 1.5 keV-os spektruma és annak megfelelő szimuláció

A 11.e. ábrán  $Sn$  1.5 keV-os debreceni mérése és szimulációja látható. A rugalmas csúcsok 1500.1 eV-on találhatók, melyeket az ábra nem tartalmaz. A rugalmas csúcs közvetlen környezetében, valamint az első veszteségi csúcsnál a szimuláció a mérés alatt van. Nagyobb energiaveszteségek szimulációja a méréshez képest kissé magasabb értéket eredményezett.

A 11.c.-11.e. ábrákon a rugalmas csúcs közvetlen környezetében a szimulációk szisztematikusan eltérnek a mérésektől. Ennek oka, hogy plazmonveszteségek mellett sávok közti vagy sávon belüli gerjesztések is történnek az  $Sn$  mintában. A 11.a és a 11.b ábrák hasonlítanak egymásra. A 11.a ábrán látható, optikai adatokból a (I.B.2.6) egyenlet alapján számított veszteségi függvény a plazmonveszteségeken kívül egyéb gerjesztéseket is leír, míg a 11.b. ábrán látható, a szimulációban alkalmazott veszteségi függvényt három Drude-függvény összegeként állítottam elő. Ez a nem plazmon-típusú gerjesztések leírására pontatlan eljárásnak bizonyult.

Mind a *polySi*, az *amorfGe* és a mikrokristályos  $Sn$  minták 200 eV-os mérésekre igaz, hogy amikor ezeket szimuláltam, a szimulációk és a mérések közt nagyobb eltéréseket tapasztaltam. Ennek egyik lehetséges magyarázata, hogy konstans energiaveszteségi függvényt alkalmaztam, pedig 200 eV-on az energiaveszteségek nagysága már jelentős a primer energiához képest. Alacsony elektron energián a felületi veszteségek hatása jelentős. Másrészt ezen az alacsony elektron energián az *IMFP* összemérhető a felületi réteg vastagságával, emiatt a felületi és térfogati veszteségek szétválasztása nem tehető meg csupán egy felületi réteg definiálásával, ahol a rugalmas szórás is elhanyagoltam. Alacsony energiákon ezért a transzport leírására célszerű részletesebb fizikai modellt alkalmazni.

## II.C. Felületi gerjesztési paraméterek meghatározása Ge és Si mintákra

Bár Ritchie cikke a felületi plazmon keltéséről már 1957-ben megjelent [66], és attól kezdve igen sok cikk foglalkozott a felületi plazmonok különböző tulajdonságaival [20, 67-77], elektronspektroszkópiai mérések kiértékelésekor ezt csak az utóbbi években kezdték számításba venni. Ennek egy lehetséges oka, hogy a felületi gerjesztések figyelmen kívül hagyásával is jó eredmények születtek, ami nagyobb energiákon (2.0 keV felett) érthető. Hozzá kell tenni, hogy valami hasonló történt a többszörös szórás figyelembe vételével is. Azt is tudtuk, hogy többszörös szórás van, mégis elég lassan



készült el az általános formalizmus, ami annak leírását lehetővé teszi. Persze ha a bevezetésben részletezett elméleteket nézzük, akkor nyilvánvaló, hogy a felületi gerjesztés hatásának beillesztése az *MC* kiértékelésben távolról sem triviális, a felületi gerjesztéseket leírhatjuk egyszerű [13] és bonyolult modellel [78-79] is.

Ha fémeket elektronokkal gerjesztünk, a mintában felületi és tömbi gerjesztések keletkeznek. A transzport elmélet, amit *MC* modellek szokásosan alkalmaznak, ezeket a gerjesztéseket többnyire nem választja külön, és leírásukra csak egy helytől független energiaveszteségi függvényt használ, míg a dielektromos elmélet külön-külön megadja a dielektromos függvény felületi és tömbi részét. Egy másik különbség, hogy a transzport elméletben egy energiaveszteség valószínűsége csak az elektron energiájától függ, míg az elektron korábbi kölcsönhatásaitól nem. Ez a lényege a valószínűségi, markovi folyamatoknak, mely értelemben a transzport elmélet egy lokális modell mind a tér, mind az idő szerint. A dielektromos elméletben viszont az elektron minden pillanatban úgy lép kölcsönhatásba az anyaggal, hogy ez a kölcsönhatás függ a saját maga keltette tértől. A kölcsönhatás így természetesen függ az elektron pályájától is, azaz e kép nem markovi folyamatot ír le. Vicanek 1999-ben összehasonlította a dielektromos és a transzport elmélet segítségével leírt elektron transzport eredményeit [96], és azt találta, hogy a dielektromos és a lokális leírás egymással mérési hibán belül ekvivalens.

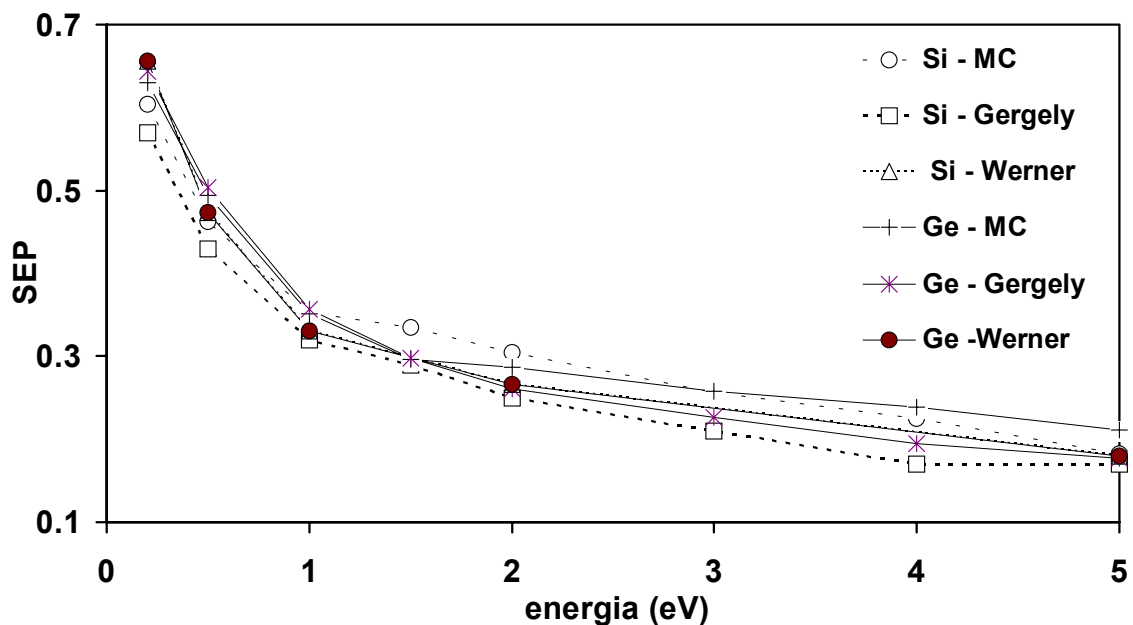
Olyan *EPES-REELS* spektrumokban, melyekben a plazmongerjesztések erősek, jól láthatók és megkülönböztethetők a felületi és a tömbi veszteségek. Ugyanakkor az is igaz, hogy ezek a csúcsok egy háttéren ülnek, és szétválasztásuk nem egyszerű. Gergely György munkatársaival erre dolgozott ki módszert [17-18], melyben a mért spektrumok alapján a tömbi és a felületi gerjesztéseket szétválasztotta. Ezzel a felületi veszteségek teljes intenzitása meghatározható és *SEP* kiszámítható. Gergely és Werner modellje szerint a *SEP* számítható az egyszeres felületi plazmon csúcs és a rugalmas csúcs arányának hányadosaként [18-19,113].

Ugyanezt a *SEP*-et Werner elméleti úton is meghatározta. Oswald munkája nyomán analitikus formulát adott [19], amely energia- és szögfüggő *SEP*-et határoz meg megfelelő  $a_H$ -val anyagi paraméterrel:

$$SEP(E) = \frac{1}{a_H \sqrt{E} \cos \alpha_i + 1} + \frac{1}{a_H \sqrt{E} \cos \alpha_d + 1}, \quad (II.C.1)$$

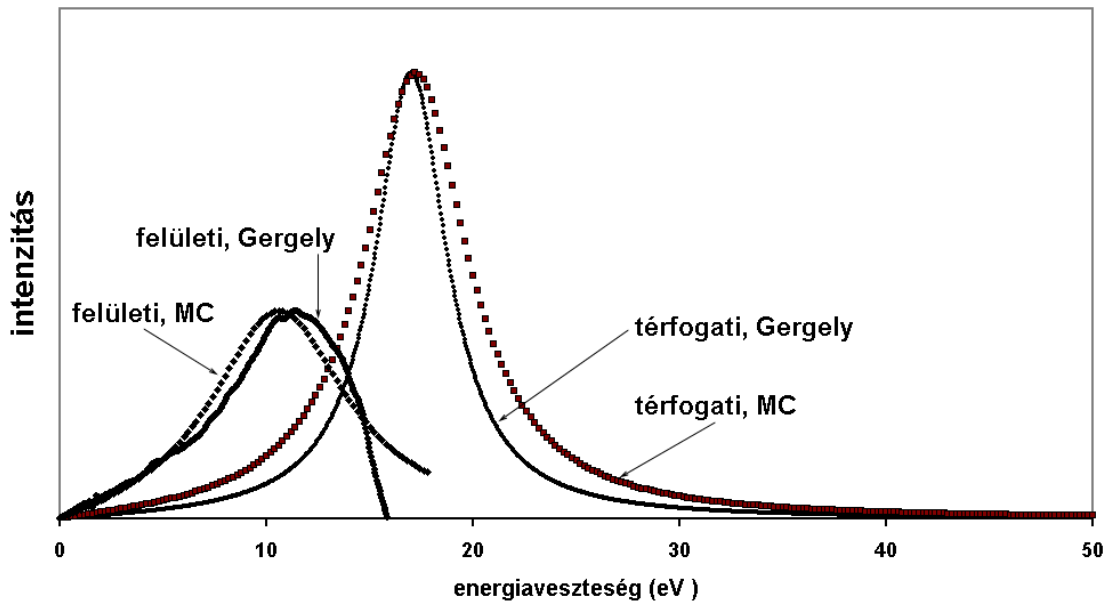
ahol  $E$  az elektron energiáját,  $\alpha_i$  és  $\alpha_d$  pedig a be- és kilépő elektronoknak a minta felületi normálisával bezárt szögét jelölik. Ez a kifejezés a teljes  $SEP$ -et adja meg. A jobb oldal első tagja a belépő, a második tag pedig a kilépő elektronok átlagos felületi gerjesztéseit adja meg. Az  $a_H$  paraméter csak az anyagra jellemző, az elektron energiájától és a mérés geometriájától független.

Mivel az  $MC$  modell a felületi és a tömbi gerjesztéseket független eseményekként, külön kezeli, a felületi gerjesztést könnyen számszerűsíthetem. A szimuláció során az egyszeres felületi gerjesztéseket és a rugalmas (energiavesztéseget nem szenvedett) elektronokat összeszámolom, és a  $SEP$  értékeket kiszámítom. A 12. ábra a Debrecenben mért *polySi* és *amorfGe* minták (teljes)  $SEP$  adatait mutatják, melyeket a mérések szimulációja során számítottam. Az ábra tartalmazza Gergely és Werner adatait is. A három különböző módszerrel meghatározott  $SEP$  értékek jól egyeznek.



12. ábra Si és Ge  $SEP$  értékek Gergely és Werner módszere, valamint az  $MC$  szimuláció alapján

Gergely módszerében és szimulációs eljárásomban alkalmazott felületi és térfogati energiavesztési függvényeket hasonlítja össze a 13. ábra.



13. ábra Energiavesztési függvények Gergely eljárásában és az MC szimulációban

Vizsgáljuk meg a 12. ábrán látott *SEP* értékeket. A teljes felületi gerjesztést tehát mind kísérleti, mind elméleti úton számszerűsíthetjük a *SEP* paraméterekkel.

Nézzük meg, miért is kell ismernünk a felületi gerjesztést a rugalmas csúcs elektron spektroszkópia szempontjából. Leginkább azért, mert ha a mérések során a detektált elektronok felületi veszteséget szenvednek, ezek módosítják a mért rugalmas csúcs intenzitást, tehát az *EPES* mérési eredményekre korrekciót kell végezni. Céлом, hogy a felületi gerjesztések számszerűsítését *EPES* mérések kiértékelésére alkalmazzam; a mért rugalmas csúcs intenzitásokat a felületi gerjesztések hatása miatt korrigáljam. Tekintsük a dielektromos leírást. Chen jellium modellel mélységfüggő felületi- és térfogati plazmonkeltés valószínűségét határozott meg (ld. 2.a. ábra). Ez az eredmény azt mutatja, hogy felületi gerjesztések történhetnek a mintán belül és kívül is. Igen fontos az, hogy a térfogati veszteség valószínűsége a felület közelében helyfüggővé válik [20,79]. Chen kimutatta, hogy a mintán belül a rugalmatlan szórás hatáskeresztmetszete közel állandó [114]. Ez az eredmény az *EPES* mérések kiértékelésére olyan hatással van, hogy a rugalmas csúcs intenzitását a felületi gerjesztéssel ugyan korrigálni kell, de első közelítésben a felületi gerjesztéseknek csak azon részével, amik a mintán kívül esnek.

A felületi gerjesztések valószínűségi eloszlásfüggvénye *Poisson* eloszlást mutat [114]. Ezért annak a valószínűsége, hogy egy elektron felületi gerjesztésben nem vesz részt:

$f_s = f^{SEP} = \exp(-SEP)$ , ahol a mintán kívüli felületi gerjesztéseket leíró teljes  $SEP$  szerepel. Ha egy  $EPES$  mérés alapján az  $I_{MC}$  elektronáramból a szokásos  $MC$  szimulációs módszerrel határozzuk meg  $IMFP$ -t, a felületi gerjesztéseket teljesen figyelmen kívül hagyjuk [115]. A felületi gerjesztésekre korrekciót végezhetünk, mellyel az  $I^{MC}$  elektronáramot módosítjuk. Így a korrigált  $I^{Corr}$  elektronáram [82]:

$$I^{Corr.} = I^{MC} * f^{SEP}, \quad (II.C.2)$$

mely értékkel a felületi gerjesztéseket a szokásos  $MC$  módszer is számítja. Megjegyzendő, hogy ha  $EPES$  módszerrel relatív  $IMFP$  értéket határozzuk meg, akkor sok esetben anélkül is megbízható  $IMFP$  adatokat kapunk, hogy a felületi gerjesztésre korrekciót végeznénk. Ennek oka az, hogy ha például a referencia és a vizsgált minta is hasonló elektronszerkezetű anyag, például átmeneti fém, a felületi gerjesztések sok esetben közel azonosak.

Relatív  $IMFP$  számításakor a szokásos  $MC$  szimulációban az elektronáramok hányadosait a következőképpen kell korrigálni:

$$\frac{I_{referencia}^{Corr.}}{I_{min\ ta}^{Corr.}} = \frac{I_{referencia}^{MC}}{I_{min\ ta}^{MC}} * \frac{f_{referencia}^{SEP}}{f_{min\ ta}^{SEP}}, \quad (II.C.3)$$

vagyis a szimuláció korrigálásakor csak a két minta  $SEP$  értékének a különbsége számít:

$$\frac{f_{min\ ta}^{SEP}}{f_{referencia}^{SEP}} = \frac{\exp(-SEP_{min\ ta})}{\exp(-SEP_{referencia})} = \exp(SEP_{referencia} - SEP_{min\ ta}). \quad (II.C.4)$$

A (III.C.4)-(III.C.5) egyenletekből érthető, hogy ha a referencia és a minta  $SEP$  értékei csak kissé térnek el (ami fémek esetén gyakori), akkor relatív  $IMFP$  meghatározásakor a két rugalmas csúcs mérés felületi gerjesztésekből fakadó hibája kompenzálják egymást. Ez a tény nagy előnye az  $EPES$  módszernek.

Ha a vizsgált minta szigetelő, akkor a referencia és a minta  $SEP$  értékei jelentősen eltérnek, a szimulációban a mért rugalmas csúcs intenzitásokra korrekciót kell végeznünk.

## II.D. Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> és SiO<sub>2</sub> IMFP meghatározása EPES módszerrel

Rétegszerkezetek vizsgálatokor széleskörűen alkalmazott analitikai eszköz az *Auger* mélységi profilírozás. Ez a módszer úgy működik, hogy ionporlasztással folyamatosan vékonyítjuk a mintát, és az aktuális felületről *Auger* jeleket gyűjtünk. Az *Auger* jelek attól függően, hogy milyen energiájú *Auger* elektronról van szó, különböző vastagságú rétegekből származnak. A mért *Auger* intenzitás a következőképpen adható meg:

$$I \sim I_0 \int N_A(z) e^{-\frac{z}{\lambda \cos \alpha_d}} dz, \quad (II.D.1)$$

ahol  $z$  azt a mélységet jelöli, ahonnan a mintából *Auger* elektronok lépnek ki  $\alpha_d$  irányban. Az *Auger* intenzitások jellemzők a minta vizsgált tartományának  $z$  mélység szerint változó  $N_A(z)$  anyagi (koncentráció) eloszlására. A fenti képlet alapján az intenzitás kiszámításához, azaz az ebből származtatható koncentráció meghatározásához szükség van  $\lambda$  (*IMFP*) értékére.

A mérések kiértékelésére szokásosan olyan *IMFP* adatokat [65] használnak, melyeket optikai adatokból határoznak meg. Ezekből vagy az *IMFP* értékekhez jól illeszkedő *TPP-2M* formula alapján kiszámíthatunk *IMFP* adatokat. Ezek az *IMFP* adatok a felületi gerjesztésekre nem érzékenyek, mivel optikai mérések során a felületi gerjesztések hatása elhanyagolható. További problémát jelent, hogy a vizsgált minta térfogati ideális elrendezéshez képest felületközeli tartománya, és így *IMFP*-je is megváltozhat. Ha az *EPES* módszerrel a mintára jellemző tényleges *IMFP* értéket akarunk meghatározni, meg kell azt vizsgálni, hogy az adott mérési körülmények mellett az irodalmi *IMFP* értékekre milyen korrekciók elvégzése szükséges.

Réteges szerkezetű, SiO<sub>2</sub>-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-SiO<sub>2</sub>-Si minta vizsgálatát kellett elvégezni Oszályunknak *Auger* mélységi profilírozással, melyben Ar<sup>+</sup>-ion porlasztást alkalmaztak. A mérések kiértékeléséhez szükségünk volt a SiO<sub>2</sub> és Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> rétegekre vonatkozó *IMFP* adatokra, amiket *EPES* módszerrel határoztam meg. A mért rugalmas csúcsokat felületi gerjesztésre korrigáltam az (II.C.2)-(II.C.4) egyenletek alapján. Erre azért volt szükség, mert a referenciának használt Si felületi korrekciós tényezője nagy, a szigetelő anyagok

( $SiO_2$  és  $Si_3N_4$ ) megfelelő felületi korrekciós tényezője pedig kicsi, és ezek hatása az *IMFP* értékek meghatározásakor nem oltják ki egymást.

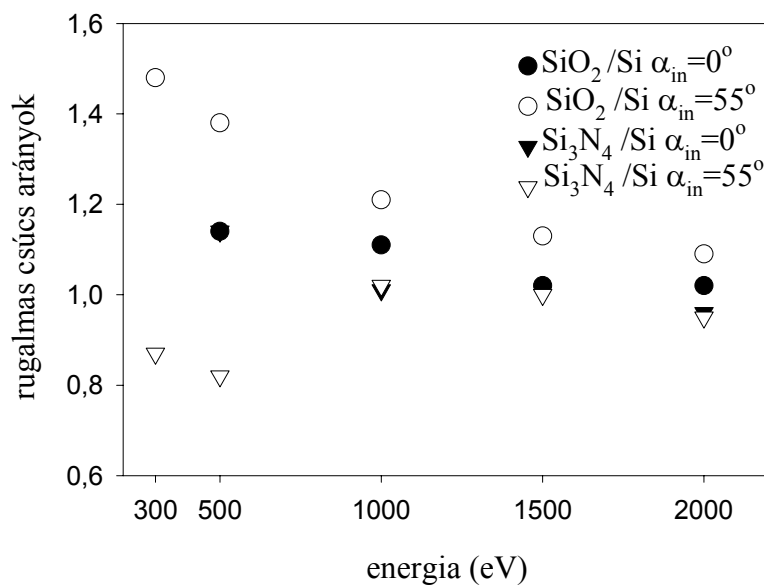
### II.D.1. Kísérlet

A vizsgált  $SiO_2$ - $Si_3N_4$ - $SiO_2$ - $Si$  vékony rétegek 60nm-60nm-20nm-100nm vastagságúak voltak. Mélységi profilírozás történt, amely különböző energiájú (300 eV-1000 eV)  $Ar^+$  ionporlasztást alkalmazott, és a profilírozás során rugalmas csúcs intenzitások, valamint veszteségi spektrumok mérése történt. Az egyes rétegekről ( $SiO_2$ ,  $Si_3N_4$ , illetve  $Si$ ) különböző energiákon felvett mérések történtek. A mért rugalmas csúcs intenzitások nem függtek a porlasztási feltételektől. A felvett *EPES-REELS* spektrumok a rugalmas csúcsot és az azt megelőző 50 eV-os veszteségi részt tartalmazzák. Az összes spektrum mérése ugyanazzal az energiafelbontással (1.2 eV) történt. A  $Si$ ,  $SiO_2$  és  $Si_3N_4$  rétegek rugalmas csúcs alakjai megegyeztek, ezért az *EPES* módszerben csak rugalmas csúcs maximumok mérése történt, és ezeket hasonlítottam össze. Az *LVV Auger* csúcsok alakja és intenzitása nem változott a  $SiO_2$ , valamint a  $Si_3N_4$  rétegek mérése során, ami azt jelenti, hogy a minta ion- és elektron bombázása nem okozott kémiai változást.

Az 1. Táblázat, valamint a 14. ábra az elektron energiájának függvényében mutatja a  $SiO_2$  és  $Si_3N_4$  rétegeken mért relatív rugalmas csúcs értékeket a  $Si$  rugalmas csúcshoz képest, két gerjesztési szög esetén.

**1.Táblázat**  
**Rugalmas csúcs arányok ( $Si$ -hoz képest)**

| energia<br>(eV) | $SiO_2/Si$<br>$\alpha_{be}=0^\circ$ | $SiO_2/Si$<br>$\alpha_{be}=55^\circ$ | $Si_3N_4/Si$<br>$\alpha_{be}=0^\circ$ | $Si_3N_4/Si$<br>$\alpha_{be}=55^\circ$ |
|-----------------|-------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------------------|
| 300             |                                     | 1.48                                 |                                       | 0.87                                   |
| 500             | 1.14                                | 1.38                                 | 1.14                                  | 0.82                                   |
| 1000            | 1.11                                | 1.21                                 | 1.01                                  | 1.02                                   |
| 1500            | 1.02                                | 1.13                                 |                                       | 1.00                                   |
| 2000            | 1.02                                | 1.09                                 | 0.96                                  | 0.95                                   |



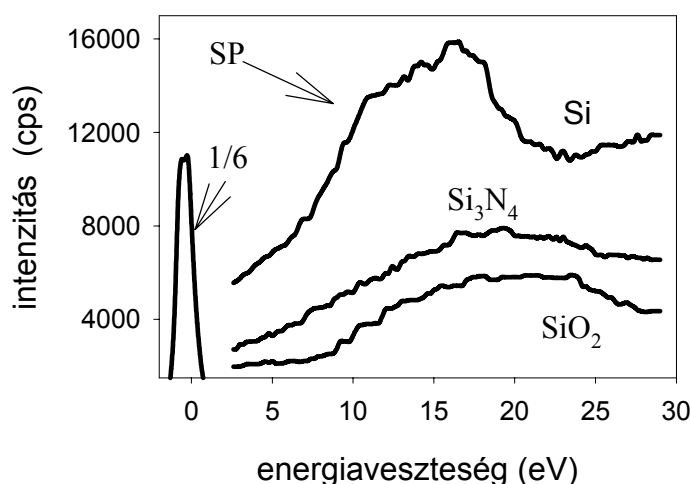
**14. ábra** DESA 100 elektron spektrométer szembe-, valamint oldalágúján mért SiO<sub>2</sub> és Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> rugalmas csúcs arányai a Si rugalmas csúcsához képest

Az *IMFP* adatokat szimulációs programommal határoztam meg. A minta olyan vastag rétegekből állt, hogy a mérések szimulációjakor elegendő volt egyetlen (*Si*, *SiO<sub>2</sub>* vagy *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>*) félvégtelen réteget feltételezni. A számításokban a *Si* referencia mintára vonatkozó *IMFP* adatokat a NIST 71 adatbázisból vettem [57]. Ennek segítségével a megfelelő elektron energia és geometriai elrendezés mellett kiszámítottam a *Si* rugalmas csúcs intenzitásokat. A mért rugalmas csúcs hányadosok alapján pedig *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* rétegek *IMFP*-jét addig változtattam a számításban, míg a számított rugalmas csúcs arányok meg nem egyeztek a mért arányokkal. Az így számított *IMFP* értékeket egy egyszerű visszakeresési algoritmussal határoztam meg, melyeket ezentúl nem-korrigált *IMFP* adatoknak hívok. Az *MC* szimuláció bemenő adatai a következők:

- *DESA 100* mérési geometriája; az elektron beesési szöge 0 ° és 55 °, a detektálás szög tartománya 19°-31°.
- A rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszeti adatai, melyeket a NIST 64 adatbázisból [105] vettem.

- A referencia (*Si*) minta *IMFP* adatai, melyeket a NIST *IMFP* adatbázisából vettem [57].
- *Si*, *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* sűrűség adatai, melyek 2.32 g/cm<sup>3</sup>, 2.33 g/cm<sup>3</sup> és 3.44 g/cm<sup>3</sup>.

A három különböző anyag rugalmatlan gerjesztései különböznek egymástól. A 15. ábra alapján, mely a három anyag *EPES-REELS* spektrumát tartalmazza, képet kaphatunk a veszteségi folyamatokról. Az ábrán a rugalmas csúcs intenzitásokat összenormáltuk, hogy a veszteségi csúcsok relatív nagysága jobban látszódjék.



15. ábra *Si*, *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* rétegeken mért *REELS* spektrumok

Az *EPES-REELS* spektrumok *SiO<sub>2</sub>* esetén mutatják a tiltott sávot, mely azonban *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* esetén a várakozás ellenére eltűnt. Ez azt jelenti, hogy *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* esetén a tömbi és a felületi tartományok különböznek egymástól.

A veszteségi intenzitások fordítottan arányosak az *IMFP*-vel, és az ábrából látszik, hogy veszteségi intenzitások *Si* esetén a legnagyobbak míg *SiO<sub>2</sub>*-nél a legkisebbek. A felületi plazmon intenzitása is durva közelítést ad a felületi gerjesztések hatásáról. *Si* esetén egy jól definiált felületi plazmon látható. Ezzel szemben a *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* spektrumok nem



mutatnak felületi plazmonra utaló jeleket. Az *EPES-REELS* spektrumok mérése 0.5 keV-on és 2.0 keV-on is megtörtént. Az elektron energiájának változásával a felületi / tömbi veszteségek aránya módosul, és emiatt a mérhető spektrum alakja is megváltozik. Mivel a mérésekben ilyen változást nem láttunk, ezért a felületi veszteséget elhanyagoltuk.

Így, mivel referencia (*Si*) minta felületi gerjesztésének valószínűsége jelentősen különbözik a szigetelő anyagokétól (*Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* és *SiO<sub>2</sub>*), *Si* esetén a mért rugalmas csúcs értékekre felületi korrekciót kellett végezni. Nyilvánvaló, hogy a szimulációs programban használt rugalmas csúcs intenzitásokat módosítani kell, melyeket megszoroztam az  $f_s$  felületi korrekciós tényezővel. Ezen korrekció elvégzéséhez ismernem kellett a *SEP* értéket az elektron energiája és a szög függvényében. *Si*-ra az  $f_s$  felületi korrekciós tényezőt Chen [20] és Werner [19] képletei, valamint Kwei adatai [21] alapján, különböző mérési geometriákra és energiákra számítottam ki a (II.C.2-II.C.4) egyenletekből. A korábbiakban tárgyaltak alapján nem meglepő, hogy Chen képletével nyert *SEP* értékek nagyobbak, mint Werner képletével, amiből az következik, hogy a számított *IMFP* értékek Werner *SEP* adatai alapján alacsonyabbak, mint Chen *SEP* adataival.

## ***SiO<sub>2</sub>***

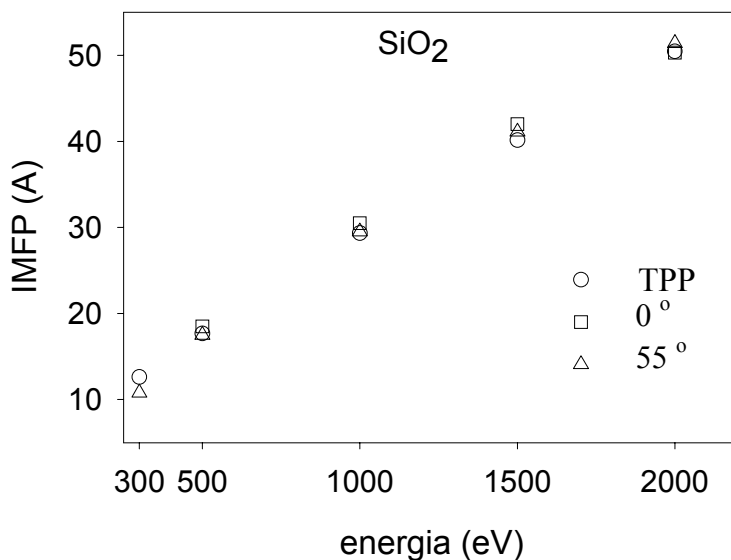
*SiO<sub>2</sub>*-re az egyes elektron energiának és geometriai elrendezésnek megfelelő tényleges *IMFP* értékeket *EPES* módszerrel határoztam meg. Mielőtt az *IMFP* értékeket a mért *Si* és *SiO<sub>2</sub>* rugalmas csúcs intenzitások alapján szimulációs programommal határoztam volna meg, különböző feltevéseket alkalmaztam. Először a felületi gerjesztés hatását mindkét anyagnál (*Si* és *SiO<sub>2</sub>*) elhanyagoltam, és így kaptam a nem-korrigált *IMFP* adatokat. Másodszor az *EPES-REELS* spektrumok alapján *SiO<sub>2</sub>* felületi gerjesztését hanyagoltam el, míg a *Si* rugalmas csúcs intenzitását ( $EP_{Si}$ -t) Chen és Werner formulái és anyagi paraméter adatai alapján a felületi gerjesztésre korrigáltam. Végül mindkét anyag mért rugalmas csúcs intenzitására korrekciót végeztem Chen képlete és Kwei *SiO<sub>2</sub>*-re vonatkozó [21] *SEP* adataiból nyert korrekciós faktorok alapján.

A 2. Táblázat ezeket a felületi gerjesztésre korrigált, illetve nem korrigált *IMFP* adatokat mutatják, együtt a *TPP-2M* formula alapján számított térfogati *IMFP* adatokkal.

**2. Táblázat**  
**Korrigált és nem korrigált SiO<sub>2</sub> IMFP adatok**

| Energia (eV) | nem korr.<br>$\alpha_{in}=0^\circ$ | nem korr.<br>$\alpha_{in}=55^\circ$ | korr. Chen<br>$\alpha_{in}=0^\circ$ | korr. Chen<br>$\alpha_{in}=55^\circ$ | korr. Chen + Kwei<br>$\alpha_{in}=0^\circ$ | korr. Chen + Kwei<br>$\alpha_{in}=55^\circ$ | Korr. Werner<br>$\alpha_{in}=0^\circ$ | Korr. Werner<br>$\alpha_{in}=55^\circ$ | TPP Optikai adatok |
|--------------|------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------------|---------------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------------------|--------------------|
| 300          |                                    | 16.8                                |                                     | 10.8                                 |                                            | 12.6                                        |                                       | 9.8                                    | 12.6               |
| 500          | 23.5                               | 24.1                                | 18.5                                | 17.5                                 | 20.2                                       | 19.7                                        | 16.5                                  | 15.8                                   | 17.7               |
| 1000         | 35.5                               | 36.3                                | 30.5                                | 29.4                                 | 32.4                                       | 32.0                                        | 27.9                                  | 26.8                                   | 29.3               |
| 1500         | 47.1                               | 48.7                                | 42.0                                | 41.2                                 | 44.0                                       | 44.0                                        | 39.0                                  | 37.8                                   | 40.1               |
| 2000         | 55.8                               | 59.3                                | 50.3                                | 51.3                                 | 52.6                                       | 54.5                                        | 47.0                                  | 47.4                                   | 50.4               |

A 16. ábrán csak a tömbi adatok és Chen adatai alapján korrigált tényleges IMFP adatok láthatók.



**16. ábra** SiO<sub>2</sub> IMFP adatai optikai adatok alapján, valamint felületi korrekcióval

A 16. ábrán látható két adatsor kiválóan egyezik. Ha megvizsgáljuk a táblázati adatokat, látható, hogy különböző beesési szögekre, felületi korrekció nélkül meghatározott IMFP adatok jól egyeznek. Ez azt jelenti, hogy szimulációs programom jól követi a szögfüggést. Mivel a felületi korrekcióval, különböző beesési szögekre meghatározott IMFP adatok szintén jól egyeznek, azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a felületi korrekció szögfüggése megbízható.

Összevettem az optikai adatok alapján nyert *IMFP* adatsort azokkal az értékekkel, melyeket úgy kaptam, hogy Chen adatai alapján felületi korrekciót végeztem el *Si*-ra (2. táblázat 5. és 10. oszlopa). Az egyezés kiváló, kivéve 300 *eV*-ot. A felületi plazmon intenzitása és még a helye is függ a felület minőségétől [116]. Ez azt jelenti, hogy a felületi korrekciós faktor,  $f_s$ , szintén függ a felület állapotától, amit az alkalmazott módszer természetesen nem tartalmaz. Előfordulhat, hogy a porlasztás során a *SiO<sub>2</sub>* (felületi) rétegben hibák keletkeznek. Arra a megállapításra jutottam, hogy a tényleges *IMFP* adatok, melyeket Chen adatai alapján elvégzett felületi korrekcióval kaptam, jól egyeznek a térfogati (optikai adatok alapján) nyert *IMFP* értékekkel. Ez azt jelenti, hogy a térfogati *SiO<sub>2</sub>* *IMFP* adatok megbízhatóan alkalmazhatók a mi esetünkben.

### ***Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>***

*Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* minta esetén a *SiO<sub>2</sub>* vizsgálatánál leírtakhoz hasonlóan jártunk el, először megvizsgáltuk a felületi gerjesztés erősségét *EPES-REELS* spektrumokban. Azt találtuk, hogy a 300 és a 2000 *eV*-os *EPES-REELS* spektrumok esetén a lehetséges felületi gerjesztés erőssége nem változott. Ezért *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>*-re a felületi korrekciós tényező,  $f_s(\text{Si}_3\text{N}_4)=1$ , felületi korrekciót a *Si* rétegen mért rugalmas csúcs intenzitásokra végeztem.

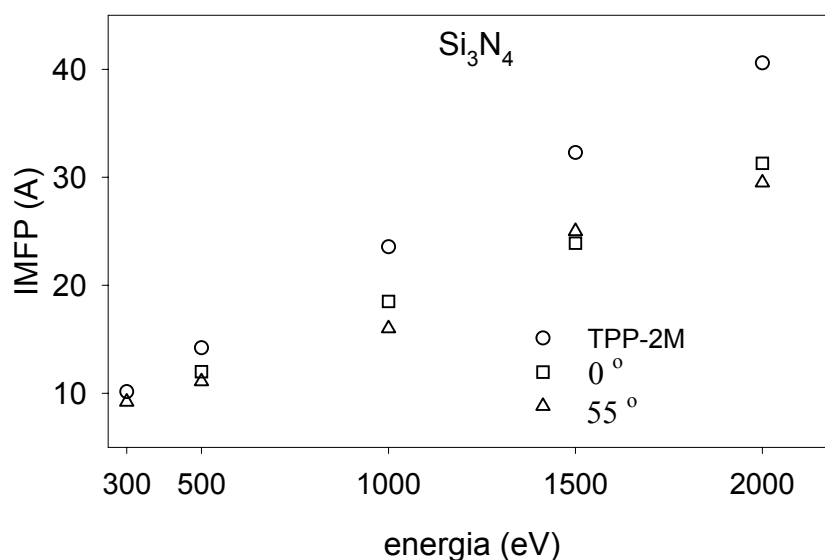
Werner *SEP* képlete [19] és Chen *SEP* formulája [20] nem ugyanazt a *SEP* mennyiséget számítja. Werner képletével a teljes, a mintán kívüli és a mintán belüli felületi gerjesztések számíthatók. Chen képletének alkalmazásakor figyelembe vesszük azt, hogy a felület közelében a térfogati gerjesztések valószínűsége csökken. Ennek a csökkenésnek, valamint a mintán belül megjelenő felületi gerjesztéseknek olyan az együttes hatása, hogy a mintán belül a gerjesztések gyakorisága közel állandó. Ezért Chen képletének alkalmazásakor a mintán kívüli felületi gerjesztéseket vesszük figyelembe.

A kísérleti eredmények tanulmányozása alapján is Werner és Chen közelítése közül Chen eljárását tartom jobbnak, felületi korrekciót ezért Chen adatai alapján végeztem el a *Si* rétegen mért rugalmas csúcs intenzitásokra. A 3. Táblázatban feltüntettem a tényleges és a *TPP-2M* formula [62] alapján meghatározott *IMFP* értékeket, melyeket a 17. ábra mutat.

3. Táblázat

 $\text{Si}_3\text{N}_4$  IMFP adatok

| energia<br>(eV) | nem<br>korr.<br>$\alpha_{\text{in}}=0^\circ$ | nem<br>korr.<br>$\alpha_{\text{in}}=55^\circ$ | korr.<br>Chen<br>$\alpha_{\text{in}}=0^\circ$ | korr.<br>Chen<br>$\alpha_{\text{in}}=55^\circ$ | TPP-2M |
|-----------------|----------------------------------------------|-----------------------------------------------|-----------------------------------------------|------------------------------------------------|--------|
|                 |                                              | 13                                            |                                               | 9.2                                            | 10.2   |
| 500             | 15.3                                         | 15.3                                          | 12.0                                          | 11.1                                           | 14.2   |
| 1000            | 21.6                                         | 19.9                                          | 18.5                                          | 16.0                                           | 23.6   |
| 1500            | 27                                           | 29.4                                          | 23.9                                          | 25.0                                           | 32.3   |
| 2000            | 34.8                                         | 34.1                                          | 31.3                                          | 29.5                                           | 40.6   |

17. ábra  $\text{Si}_3\text{N}_4$  IMFP adatai optikai adatok alapján, valamint felületi korrekcióval

Látható, hogy míg alacsony energián az egyezés elfogadható, magasabb energiákon az eltérés jelentős. A *TPP-2M* formula tartalmazza az  $N_v$  valencia elektronok számát, az  $E_g$  tiltott sáv energiáját és a  $\rho$  anyagi sűrűséget (a 3. táblázatban számított értékeket rendre  $N_v=32$ ,  $E_g=5.4$  eV és  $\rho=3.44$  g/cm<sup>3</sup> értékekkel kaptam). Megvizsgáltam, hogy a képlet alapján számított *IMFP* milyen paraméterekre érzékeny. Tiltott sávot a mért spektrumban nem észleltünk, ami egyébként a számított *IMFP* értéket csak kissé módosítaná. Ellenben a *TPP-2M* formulával végzett számításban megváltoztattam  $\text{Si}_3\text{N}_4$  sűrűség adatát, és az így kapott adatokat vetettem össze a Chen adatai alapján korrigált *IMFP* értékekkel. Ezt az eredményt a 4. Táblázat mutatja.

**4. Táblázat      Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> IMFP adatok**

| Energia<br>(eV) | korr.<br>Chen<br>$\alpha_{in}=55^\circ$ | TPP-<br>2M |
|-----------------|-----------------------------------------|------------|
| 300             | 10.4                                    | 10.4       |
| 500             | 12.9                                    | 14.6       |
| 1000            | 20.3                                    | 24.3       |
| 1500            | 27                                      | 33.3       |
| 2000            | 38                                      | 41.9       |

Ha összehasonlítjuk a 3. Táblázat utolsó két oszlopát és a 4. Táblázatot, láthatjuk, hogy a különbség jelentősen csökkent. Ebben az esetben számításomban a sűrűséget 15%-al csökkentettem ( $\rho = 3.0 \text{ g/cm}^3$ ). A sűrűség megváltozására vonatkozó mérési adatok nem álltak rendelkezésemre.

## **II.E. Réteges szerkezetű minták EPES mélységi feltérképezése**

Számos analitikai technológia, pl. *SIMS* (*Secondary Ion Mass spectroscopy* - Szekunder ion tömegspektrometria), *AES*, *XPS* vagy *EPES* mélységi feltérképezése alkalmaz alacsony energiájú ( $< 5 \text{ keV}$ ) ionokat. Az ionnyaláb megváltoztatja a minta felületközeli rétegét, melyben felületi durvulást és koncentrációváltozást tapasztalhatunk. Az utóbbit ionkeveredésnek hívjuk [117]. Ha az ionnyaláb a mintát súrlódó szögben éri, energiája alacsony és közben a mintát forgatjuk, a felületi durvulás jelentősen csökken [118-119]. A felületközeli réteg eredeti koncentrációja annál jobban változik meg, minél nagyobb az ionenergia. Az ionkeveredés még alacsony ionenergiánál is jelentős lehet. Az ionnyaláb energiáján kívül beesési szöge is befolyásolja, hogy a porlasztás hatására inhomogenné vált réteg milyen vastagságú. A mélységi feltérképezés során folyamatosan távolítunk el rétegeket, és közben a mintáról információt gyűjtünk. Ha a feltérképezés során elektronokat detektálunk, a detektált spektrum függ az elektronnyaláb beesési szögétől és a minta *IMFP*-jétől. Az elektronok a mintában az atomi potenciálon szóródnak. Mivel a potenciál függ a rendszámtól, a rugalmas szórás erősen függ az elektron pályája menti koncentráció-eloszlástól. Egy megváltozott összetételű anyagban tehát az elektron pályája függ az elektron és az ion beesési szögétől, energiájától.

Az *AES* mélységi feltérképezés, mellyel a porlasztás során folyamatosan változó felületi tartományból érkezett *Auger* elektronok detektálhatók, gyakran alkalmazott eszköz, hogy

vékony rétegeket, rétegszerkezeteket, határátmenetet vizsgáljunk. Hogy a mért *Auger* jelekből a minta eredeti koncentráció-eloszlását meghatározzuk, figyelembe kell vennünk az ionnyaláb módosító hatását. A mélységi felbontás [1], mely megszabja a módszer alkalmazhatóságát, sokat javult az alacsony, kis szögben beeső ionnyaláb, valamint a mintaforgatás alkalmazásával. A módosult felület vastagsága a *nm*-es tartományba esik, ha megfelelő porlasztási feltételeket alkalmazunk [120]. Az *Auger* elektronok *IMFP*-je meghatározza az információs mélységet. A módosult *nm*-es tartomány ezzel az információs mélységgel összemérhető.

A minta felületi tartományában, ahol az anyagi eloszlás erősen változik, az ionporlasztás hatására fellépő ionkeveredés a koncentráció változásokat csökkenti. Ennek ellenére sok esetben még az ionkeveredés hatása mellett is erősen változó koncentráció eloszlást találhatunk a minta felületközeli tartományában. Ha ilyen változásokat az *Auger* elektronok *IMFP*-jéhez képest kis távolságon belül találunk, az *Auger* jelek e változásokat nem képesek megkülönböztetni, erről a tartományról csak átlagos információt kapunk *AES* profilírozással.

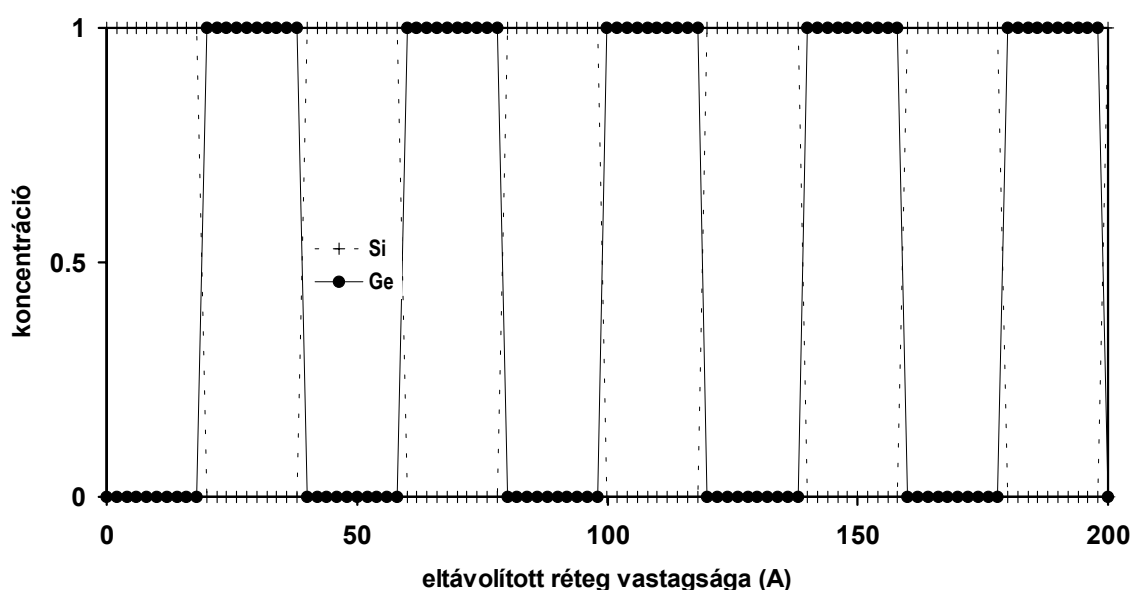
Rugalmas csúcs *-EPES-* mélységi feltérképezés, mellyel a porlasztás során folyamatosan változó felületi tartományból érkezett rugalmasan visszaszórt elektronok detektálhatók, a minta aktuális felületi rétegéről adnak információt, éppúgy, mint az *Auger* mélységi feltérképezés. Ez a módszer ugyan nem olyan általánosan alkalmazható felületanalitikai eszköz, mint az *AES* mélységi feltérképezés, speciális esetekben mégis előnyös lehet e módszer alkalmazása.

*EPES* feltérképezés során az elektron energiáját és a mérés geometriáját változtathatjuk. A rugalmas csúcs intenzitása *MC* programmal számítható, a geometria és az energia változtatásának beillesztése a szimulációba csak a bemenő paraméterek módosítását jelenti. Ilyen számítások előnye az, hogy egy adott mintára a bemenő adatok könnyen változtathatók. Az energián és a geometrián kívül bemenő adatok még a minta koncentráció-eloszlása.

Rugalmas csúcs mérések során mielőtt az elektronok elhagyják a mintát, részt vehetnek egyszeres és többszörös rugalmas szórában is. Amikor a szimulációban egyszeres szórást vizsgáltam, csak azoknak az elektronoknak számítottam a rugalmas csúcs intenzitását,

amelyek a szimulációban egyetlen nagyszögű rugalmas szórás után, míg a többszörös szórás vizsgálatakor azokat, melyeket tetszőleges számú rugalmas szórás után hagyták el a mintát a detektor irányában. A szimulációs eredmények alapján megvizsgáltam, milyen különbséget okoz, ha *EPES* mélységi feltérképezés kiértékelésében egyszeres, illetve többszörös rugalmas szórást tételezek fel. Megvizsgáltam olyan mintákat, melyekben nincs ionkeveredés, és olyanokat is, melyekben van. Azokat a mintákat, melyekben nincs ionkeveredés, ezentúl ideális mintáknak hívom. A számításokban adott koncentráció-eloszlású, kétkomponensű *Ge-Si* minták rugalmas csúcs mélységi feltérképezését szimuláltam.

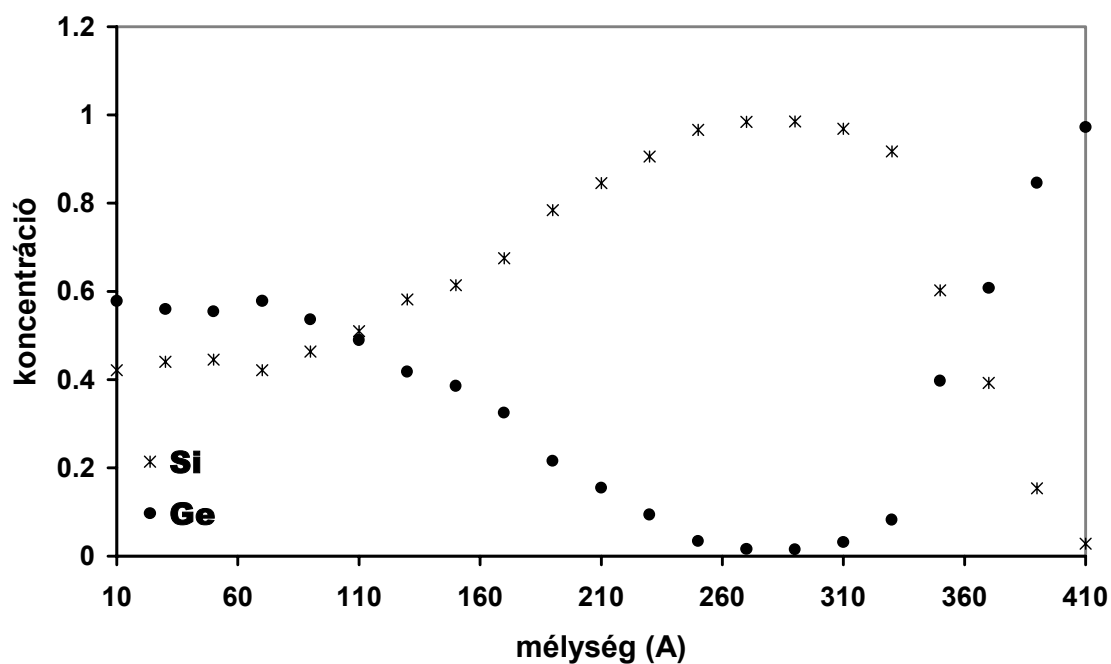
A 18. ábrán látható ideális mintában azonos vastagságú, 20 Å *Ge* és *Si* rétegek váltják egymást. A koncentrációváltozások lépcsőfüggvény alakúak, a rétegek közti átmenet vastagsága egy atomsor.



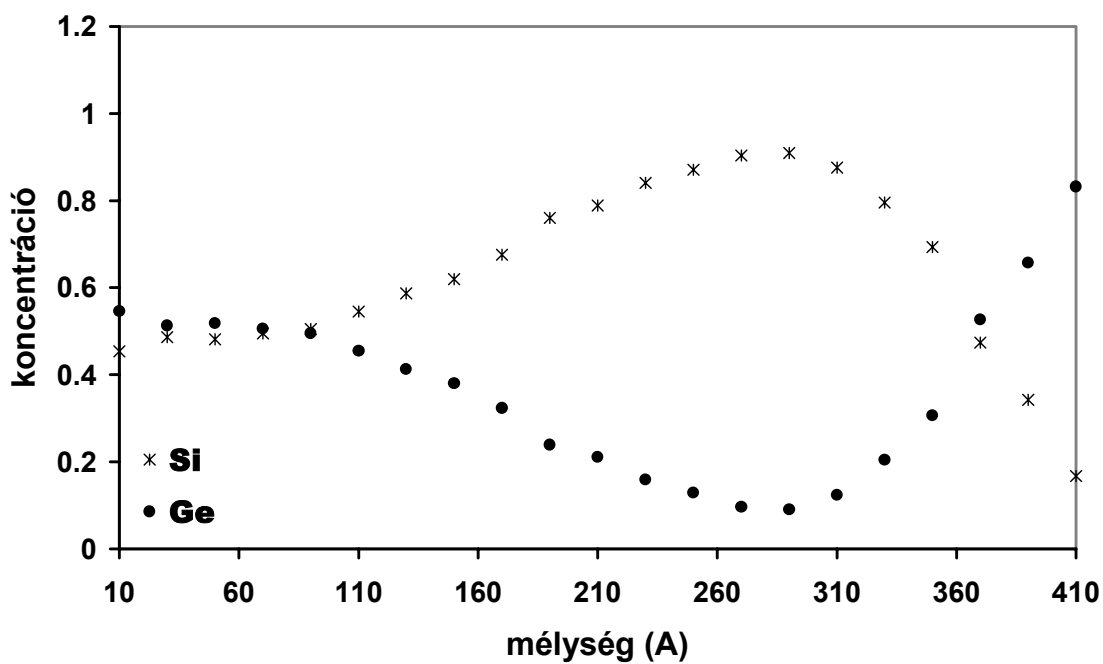
18. ábra Ideális *Ge-Si* minta koncentráció-eloszlása

Az ideális mintán kívül olyan *Ge-Si* rétegsoros mintákon is szimuláltam rugalmas csúcs mélységi feltérképezést, mely mintákban a rétegek közötti ionkeveredést *TRIM* szimulációval számítottam [121]. Ezeket a mintákat a következőkben triviálisan inhomogén mintáknak fogom hívni. Az inhomogén minták koncentráció-eloszlását a *TRIM* számítások szolgáltatják. Feltételeztem, hogy ezekben a mintákban ionporlasztás előtt 30 Å vastagságú *Ge* és *Si* rétegek váltják egymást. Az ionporlasztás hatására a rétegek között

ionkeveredés lép fel. A 19-21 ábrákon tetszőlegesen kiválasztott pillanatokban láthatók 300, 600 és 1000  $eV$ -os energiájú  $Ar^+$  ionnyaláb hatására 30  $\text{\AA}$  vastagságú réteg koncentráció-eloszlása.

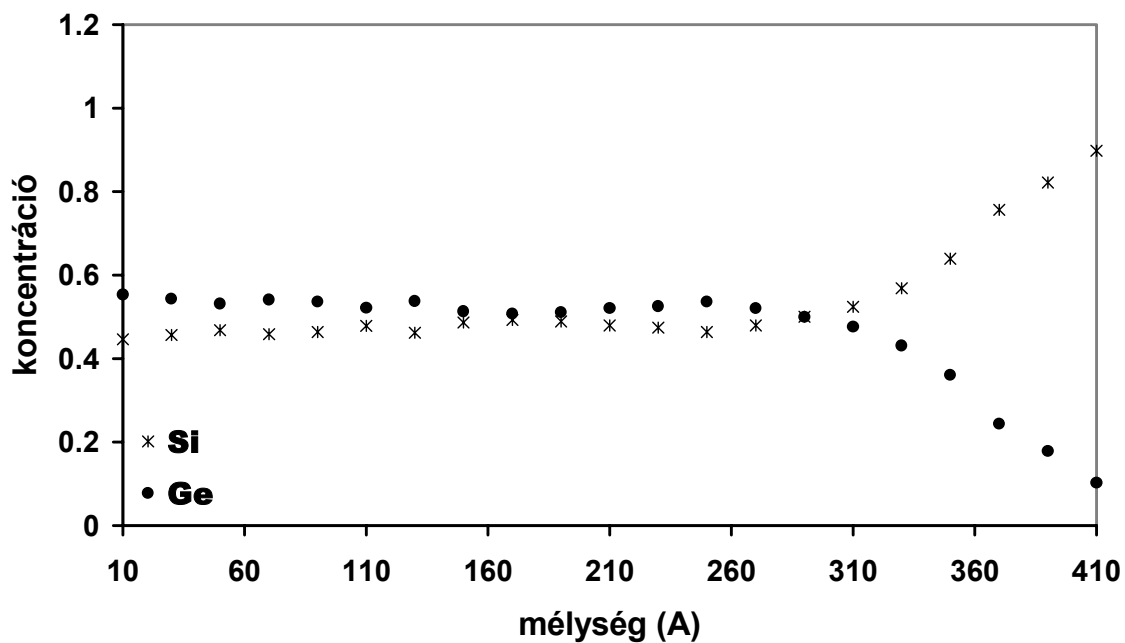


19. ábra 300  $eV$   $Ar^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta koncentráció eloszlása



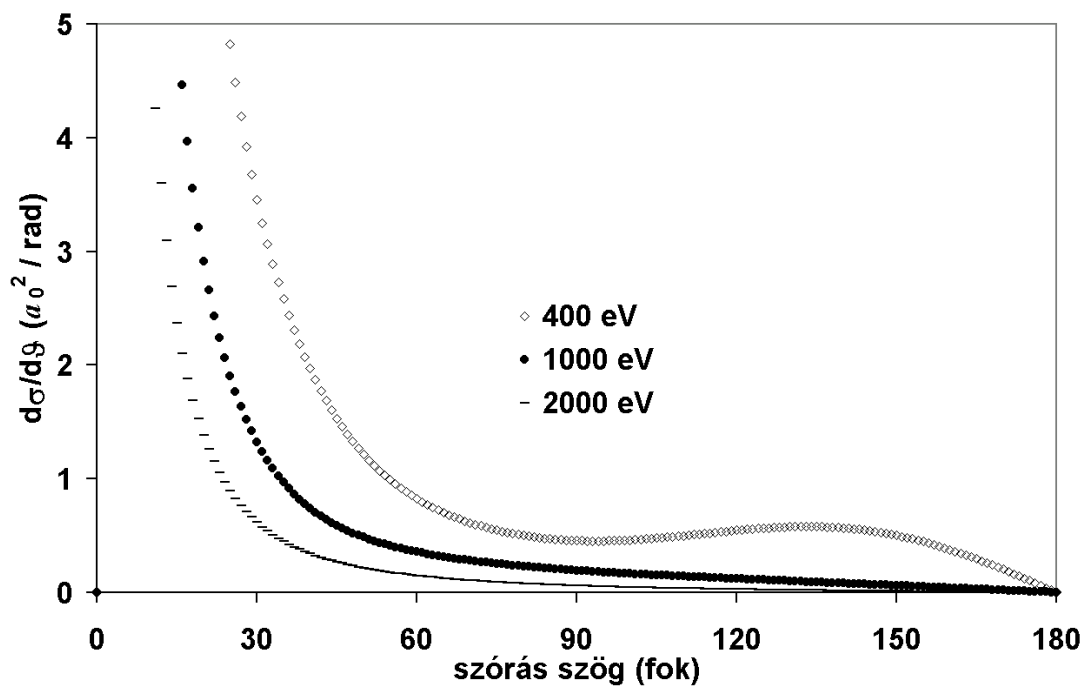
20. ábra 600  $eV$   $Ar^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta koncentráció eloszlása





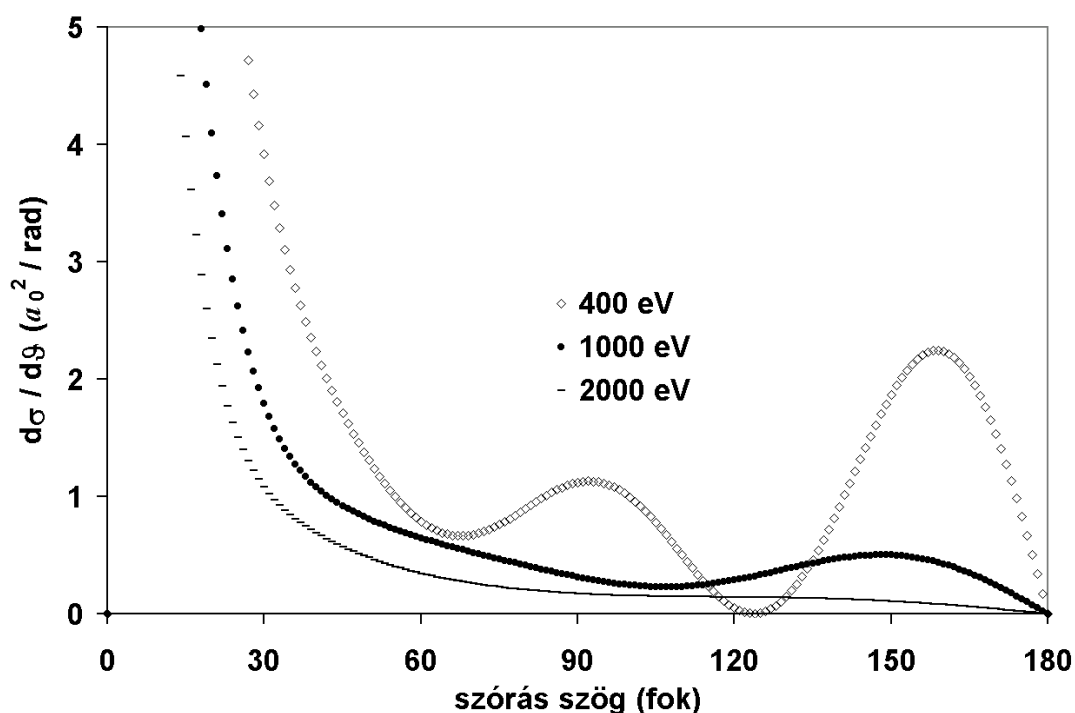
21. ábra 1000 eV  $Ar^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta koncentráció eloszlása

Az ideális mintán számított rugalmas csúcsok változását több elektron energia és mérési geometria mellett is megvizsgáltam. Az 22-23. ábrán különböző energiákon láthatók *Si* és



Ge rugalmas szórásra vonatkozó hatáskeresztmetszetei.

22. ábra Si rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszete



23. ábra Ge rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszete

Látható, hogy az energiával a hatáskeresztmetszetek alakja jelentősen változik, és ez a tény a mérések során bonyolult módon befolyásolhatja a rugalmas csúcs intenzitásának változását.

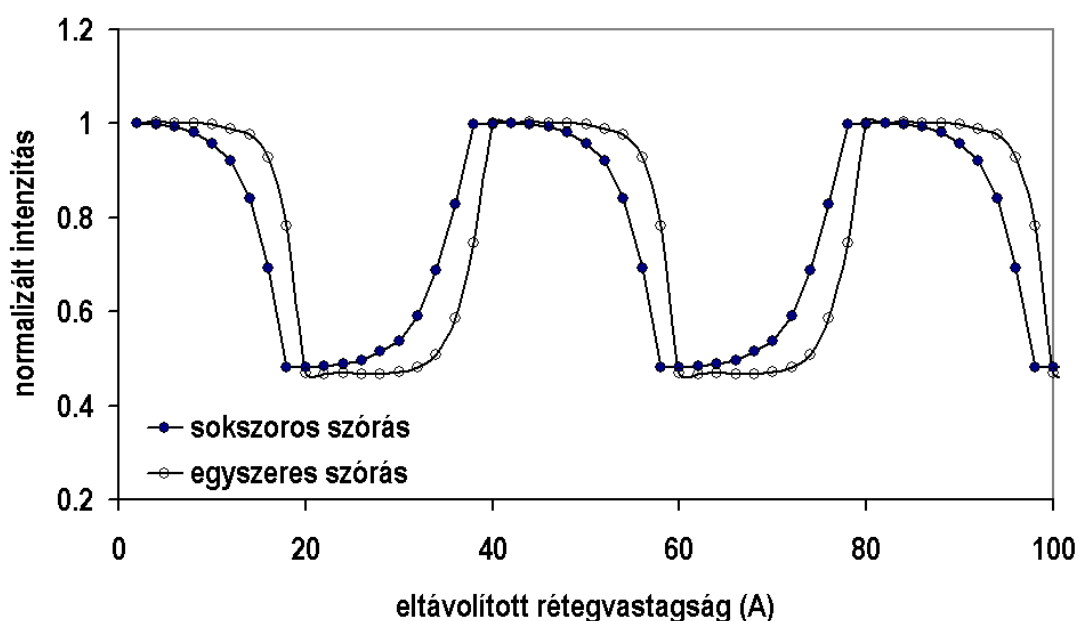
Az MC szimulációban a mérési geometriát változtattam. Az elektron energiáját  $0.5\text{ keV}$  -  $5.0\text{ keV}$  között változtattam. A rugalmas szórás hatáskeresztmetszetét a NIST 64 adatbázisból [105] vettem, a Si és Ge minták IMFP adatait pedig a NIST 71 [57] adatbázisból, és egy i-dik réteg IMFP-jét gyakran alkalmazott módszerrel számítottam [122]:

$$\frac{1}{\lambda_i} = \frac{c_{Si}}{\lambda_{Si}} + \frac{c_{Ge}}{\lambda_{Ge}},$$

ahol  $c_{Si}$  és  $c_{Ge}$  a rétegen belül Si, illetve Ge koncentrációját jelölik, és  $c_{Si} + c_{Ge} = 1$ . A szimulált rugalmas csúcs profilírozás kiértékelésére alkalmas a rugalmas csúcs intenzitásának változásának vizsgálata. A feltételezett (lehetséges) mintákon a rugalmas csúcs amplitúdóinak változását hasonlítottam össze, amikor egyszeres, illetve amikor

többszörös rugalmas szórást számítottam. A könnyebb összehasonlíthatóság kedvéért a görbéket egyre normáltam.

Nézzük meg, milyen eltérést látunk az egyszeres és a sokszoros szórást feltételező számítások eredményeiben. Ideális anyagra először megvizsgáltam, hogy hogyan változnak a szimulált profilok az elektron energia függvényében, amikor a belépő elektron a mintára merőleges, a detektálási szög tartománya pedig  $0^\circ$ - $42^\circ$ , amely egy tipikus *RFA* elektron spektrométer mérési geometriájának felel meg.



**24. ábra** Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja *RFA* elektron spektrométeren, 300 eV elektron energián

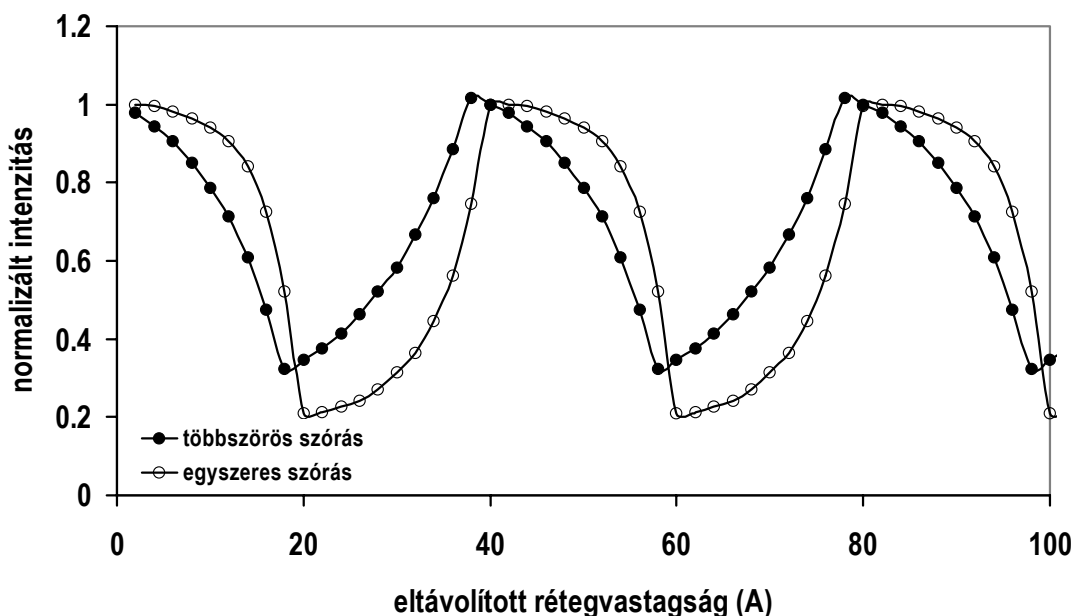
A 24. ábra ideális minta rugalmas csúcs mélységi feltérképezését szimulálja, ahol az elektron energiája 300 eV. A szimulációban az egyes pontok megfelelnek egy adott mélységi koncentráció-eloszlással jellemzett mintán számított rugalmas csúcs intenzitásnak. A 18. ábrán látható az ideális minta koncentráció-eloszlásra, ami alapján egy pontban számítottam ki a rugalmas csúcs intenzitást egyszeres, valamint többszörös szórással. A minta koncentráció-eloszlásának megváltozása miatt a spektrumban a rugalmas csúcs intenzitások is változnak a maximális és a minimális értékek között. Egy szimulációban bizonyos számú elektron transzportját szimulálok. Ezek valamekkora hányada érkezik a detektorba. A számításban az energiavesztés nélkül detektált elektronoknak természetesen csak egy részét észlelem egyetlen rugalmas szórás után. Ezért amikor a spektrumban összehasonlítom, hogy a minta eloszlásának változásával hogyan

módosul egymáshoz képest az egyszeres és a többszörös rugalmas szórás alapján számított spektrum, az intenzitások maximumát mindkét esetben egyre normálom. A minta mélység szerint változó eloszlására az *EPES* feltérképezés akkor érzékeny, ha egymáshoz közeli pontokban jelentős a rugalmas csúcs intenzitások változása.

A 24. ábrán látható spektrum érzékeny a koncentráció-eloszlás változására, az egymás melletti pontokban számított értékek is jelentősen különböznek egymástól. Ugyanakkor hasonlítsuk össze az az egyszeres, illetve a többszörös rugalmas szórásokat számító spektrumokat! Hasonlítsuk össze a spektrumok alakját és az egyes pontokban intenzitásuk értékét is. Mivel kísérleti *EPES* mélységi feltérképezéskor a mérési bizonytalanság szokásosan eléri az 5%-ot, ezért csak olyan esetben hívom fel a figyelmet az egyszeres és a többszörös számítások alapján nyert spektrumok közti különbségekre, amikor vagy a spektrumok alakja különbözik jelentősen, vagy találhatók olyan pont(ok), ahol az intenzitások különbsége meghaladja az 5%-ot. Abban az esetben, amikor sem a spektrumok alakja, sem az intenzitások közt nem találok nagy különbséget, azt hangsúlyozom, hogy az egyszeres és a többszörös rugalmas szórásokat számító spektrumok között lényeges különbség nem látható.

A 24. ábrán a spektrumok alakja hasonló, az abszcissza irányában azonban a két spektrum eltolódott. Az eltolódás következtében ha az egyes pontokban összehasonlítjuk az intenzitások értékét, a spektrumok néhány pontban jelentősen eltérnek. Ennek ellenére ha valamelyik spektrumot eltoljuk úgy, hogy a két profil a lehető legjobban illeszkedjék, akkor a többszörös és az egyszeres szórások eredményét bemutató görbék közt lényeges különbség nem látható.

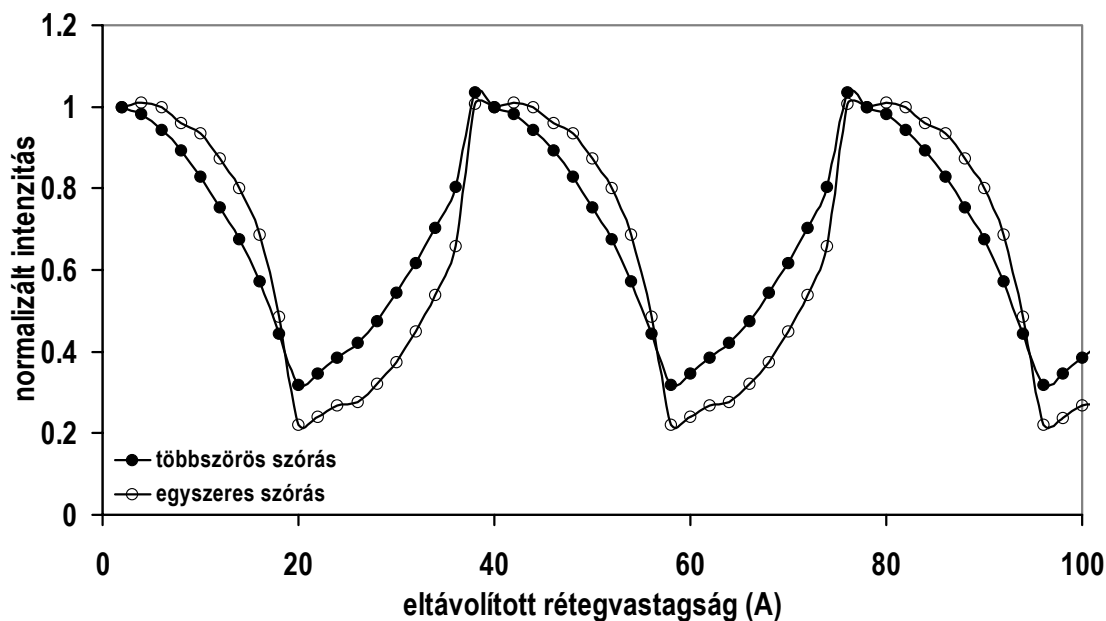
Lássuk, hogy a különbség hogyan változik az elektron energiájának változtatásával. A 25. ábrán az ideális minta *EPES* mélységi profilját mutatja, ha a primer energia  $1000\text{ eV}$ .



**25. ábra** Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja RFA elektron spektrométeren, 1000 eV elektron energián

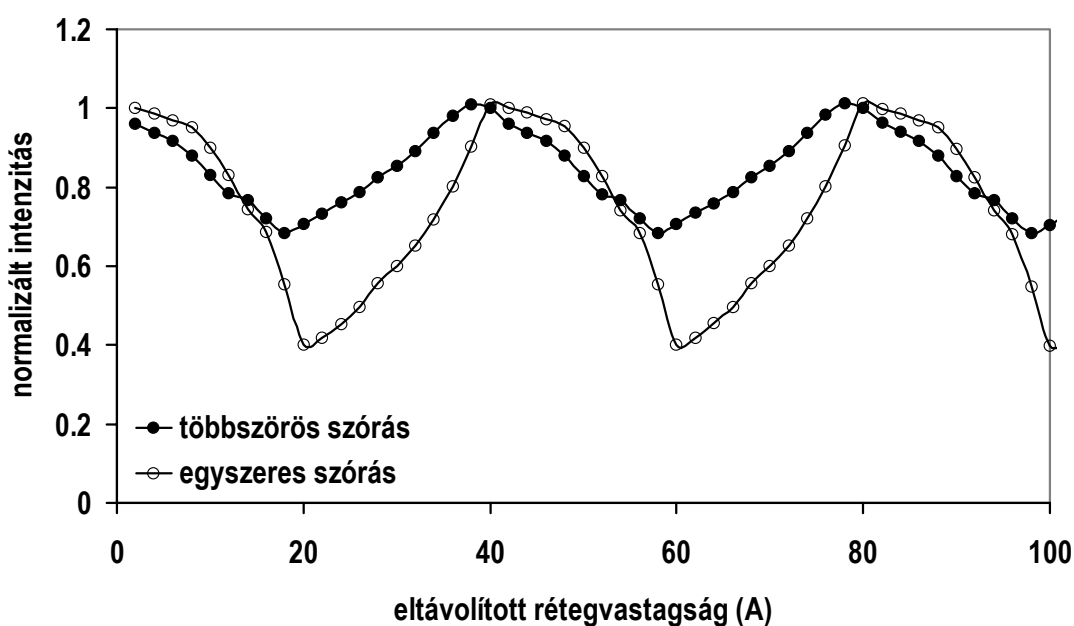
Látható, hogy a rugalmas csúcs intenzitása az egyszeres szórási képben jobban változik, mint a többszörösben. Ez az eredmény nem meglepő, hiszen az elektronok a többszörös szórás során nagyobb rétegvastagságból gyűjtenek információkat, ezzel a képpel a változó koncentráció-eloszlású tartományról átlagos jelet kapunk, ami megfelel egy tényleges mérésnek is. Azt, hogy a szimuláció 300 eV-os elektron energián kisebb mértékű eltérést eredményezett 1000 eV-hoz képest, magyarázhatjuk azzal, hogy a 300 eV-os *IMFP* miatt az elektronok a többszörös rugalmas szórás ellenére is vékony tartományból jutnak a detektorba. A 19. ábrán látható anyagi eloszlás pedig ilyen kis tartományon belül nem változik jelentősen. A spektrumok intenzitása az egyes pontokban (az egyre normált) maximumok és a minimumok közt változnak. Az egyszeres és a többszörös szórási kép alapján számított intenzitások minimuma 11.4 %-al tér el. A többszörös szórási képben számított minimumok meghaladják az egyszeres szórási képpel számított megfelelő minimum értékeket. Ez érthető, mivel abban a pontban, ahol a rugalmasan visszaszórt elektronok minimumot adnak, a többszörös szórás jobban átlagolja a koncentráció-változásokat. A 25. ábrán is látható eltolás a két spektrum között az abszcissa irányában.

A 26-28. ábrán látható, hogy az elektron energiájának növelésével hogyan változik az egyszeres, illetve többszörös rugalmas szórást feltételező szimulációk különbsége.



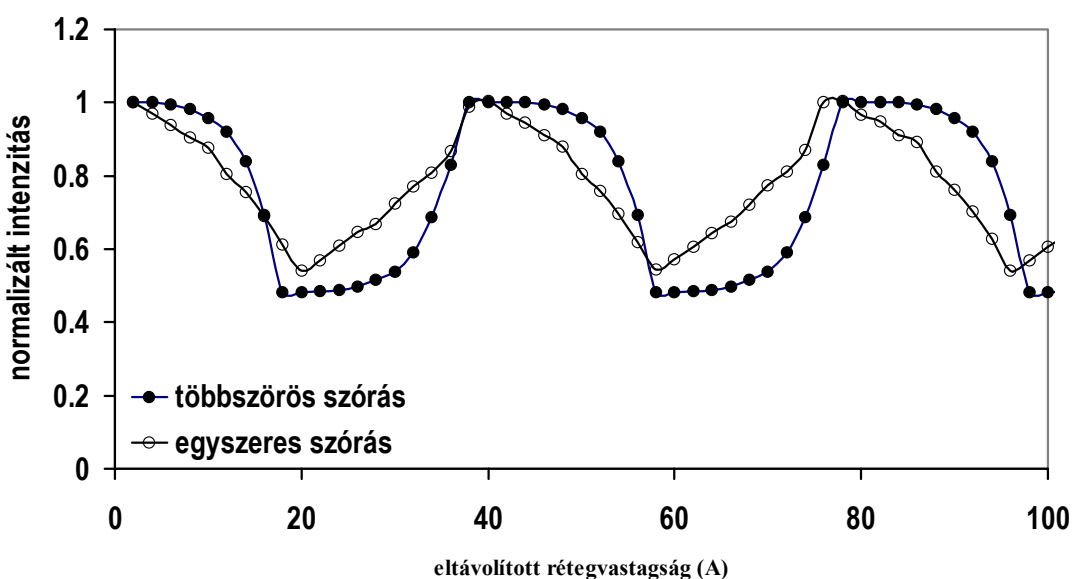
26. ábra Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja RFA elektron spektrométeren, 2000 eV elektron energián

A 26. ábrán látható, hogy 2000 eV-on is különböznek az egyszeres és a többszörös rugalmas szórást számító spektrumok. A különbség mértéke azonban csökken az 1000 eV-os számításokhoz képest. Ha a minimumok különbségét leolvassuk, 9.6 %-ot kapunk. Ebből látható, hogy az elektron energiájának változtatásával a rugalmas és a rugalmatlan szórások együttes hatása sokszor kiszámíthatatlan, meglepő eredményekre vezet, hasonlóan ahhoz, mint ahogy azt Konkol Attila és Menyhárd Miklós kimutatták [97].



**27. ábra** Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja RFA elektron spektrométeren, 3000 eV elektron energián

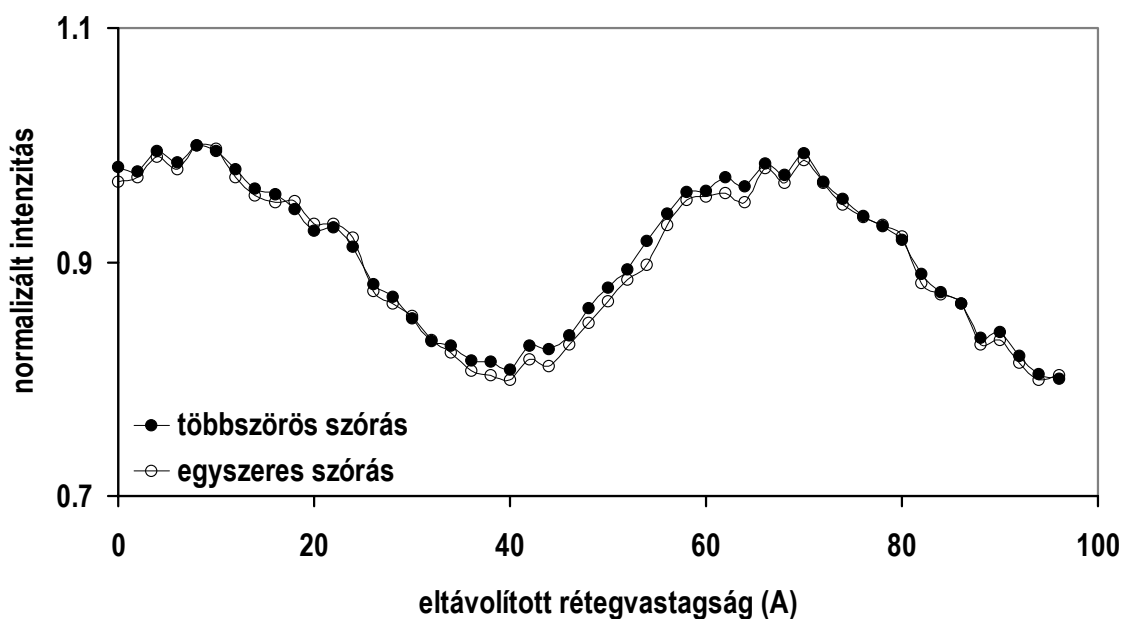
A 27. ábrán látható 3000 eV-os elektron energián végzett szimulációban nagy eltérést látható az egyszeres és a többszörös rugalmas szórás számító spektrumokban. A két spektrum minimumai között az eltérés 28.6 %. Ekkora különbség már jelentős hibát okozhat, ha egy mérés eredményét egyszeres rugalmas szórással értékeljük ki. Az intenzitáskülönbségeken kívül a spektrumok alakja is jelentősen eltér.



**28. ábra** Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja RFA elektron spektrométeren, 5000 eV elektron energián

A 28. ábrán 5000 eV-os elektron energián látható az ideális minta mélységi feltérképezésének szimulációja egyszeres és többszörös rugalmas szórásokat számítva. Az egyszeres és a többszörös szórásokat feltételezett számítások intenzitás minimumai csak 6.5 %-al különböznek. Ugyanakkor a két profil alakja lényegesen különbözik. Az egyszeres rugalmas szórás számító spektrum a minimum és a maximum között csaknem egyenes szakaszból áll, a többszörös szórás spektruma pedig hullámzó görbét ír le. 30 Å anyag eltávolításakor a két számítás 21 % különbséget mutat. A fenti rugalmas csúcs mélységi profilokból látható, hogy ideális mintán az elektron energiájának változtatásával a szimuláció nagy különbséget eredményezett, amikor a mérési geometria nagy detektálási szögnek, 0-42°-nak felelt meg 0°-os beeső elektron mellett.

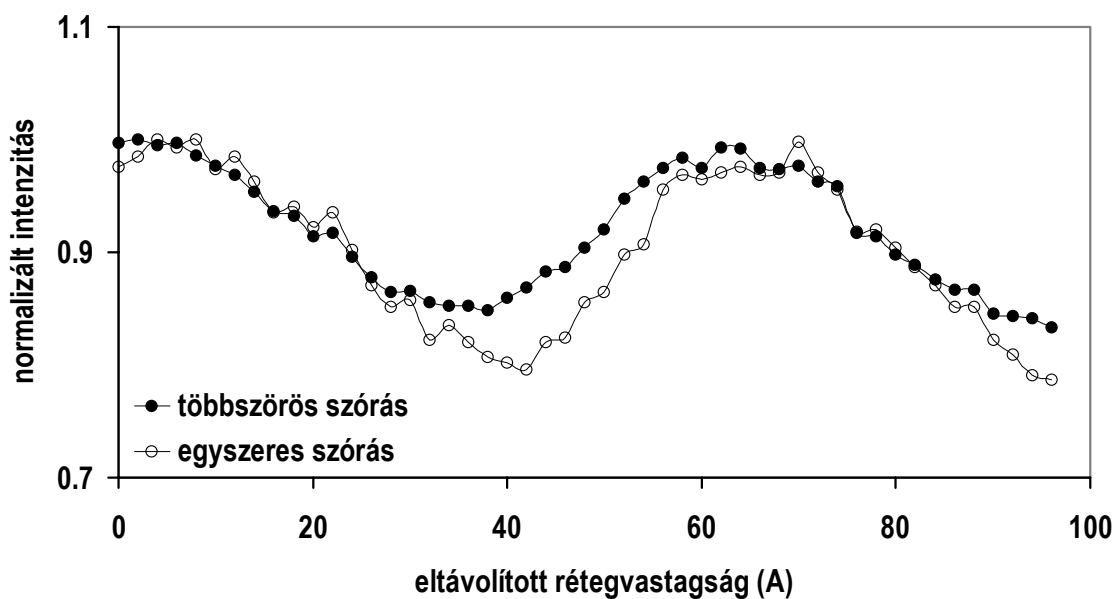
Vizsgáljuk meg, hogy ha jóval kisebb detektálási szögre végezzük el a szimulációt, az ideális mintán az egyszeres és a többszörös rugalmas szórások milyen különbséget eredményeznek. A 29-32. ábrán *CMA* elektron spektrométernek megfelelő geometriai elrendezést,  $0^\circ$ -os beesési és  $42 \pm 6^\circ$ -os detektálási szöget tételeztem fel a felület normálisához képest  $0.5\text{ keV}$ ,  $1.5\text{ keV}$  és  $2.5\text{ keV}$  elektron energiánál.



**29. ábra** Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja *CMA* elektron spektrométeren,  $500\text{ eV}$  elektron energián

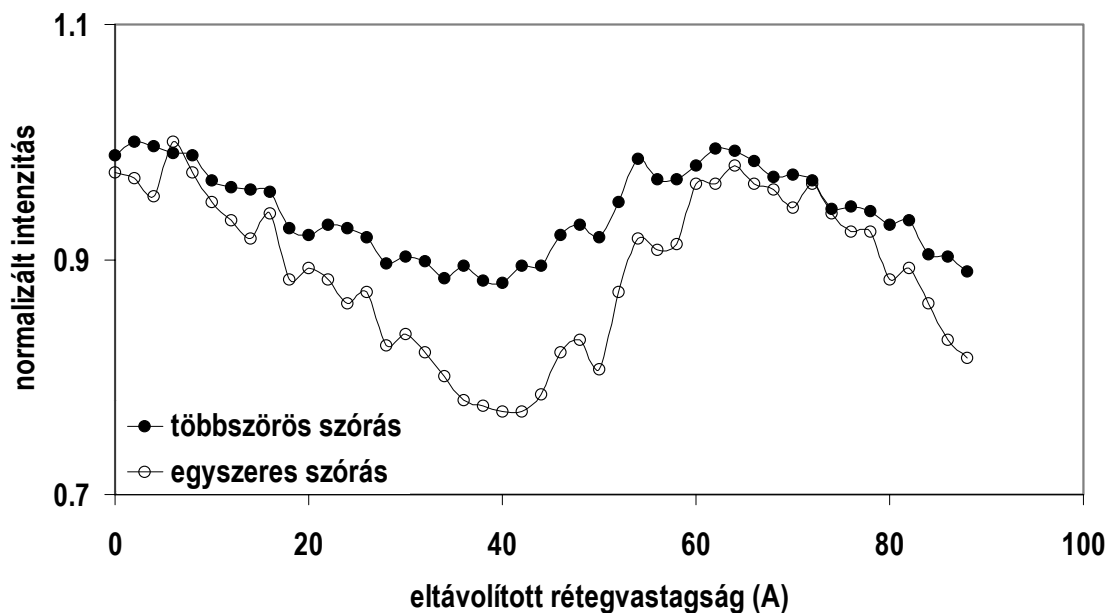
A 29. ábrán látható profilok különbsége elhanyagolható mind intenzitásban, mind jellegében. A görbék menete megegyezik, és az egyszeres és többszörös szórással számított spektrumok között jelentős különbség nem látható. Vizsgáljuk meg, hogyan változnak a profilok az energia növelésével!





30. ábra Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja CMA elektron spektrométeren, 1500 eV elektron energián

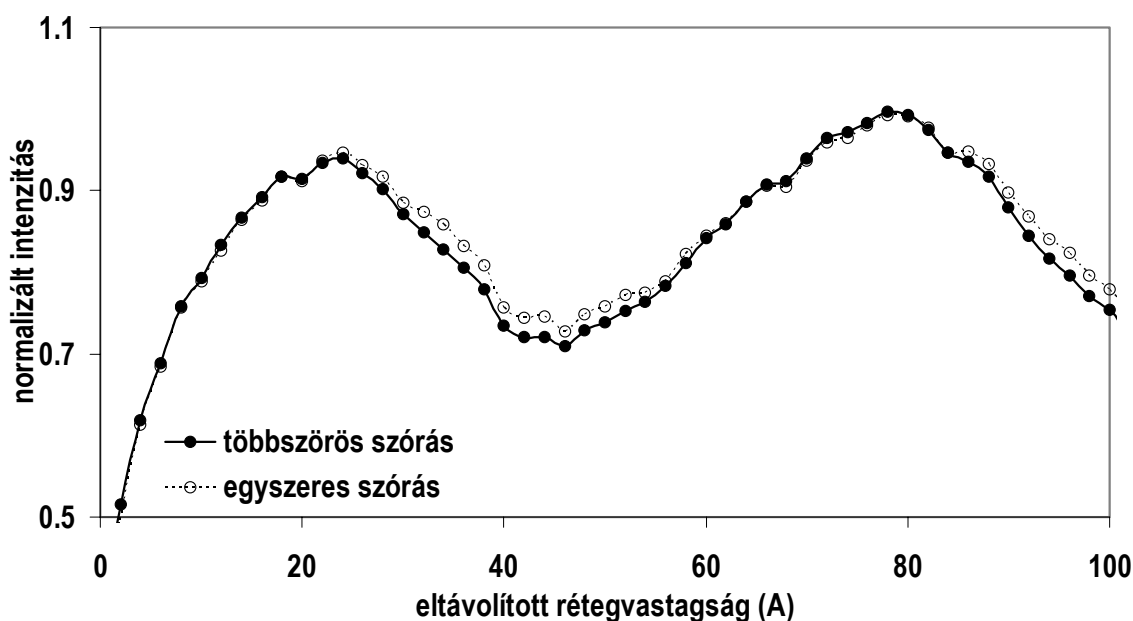
A 30. ábrán látott profilok különbsége nagyobb az előző ábrához képest, az egyszeres rugalmas szórást mutató eredmény menete kissé eltér a többszörös szóráséhoz képest. Az intenzitások különbsége azonban minden pontban kisebb, mint 8%.



31. ábra Ideális minta szimulált EPES mélységi profilja CMA elektron spektrométeren, 2500 eV elektron energián

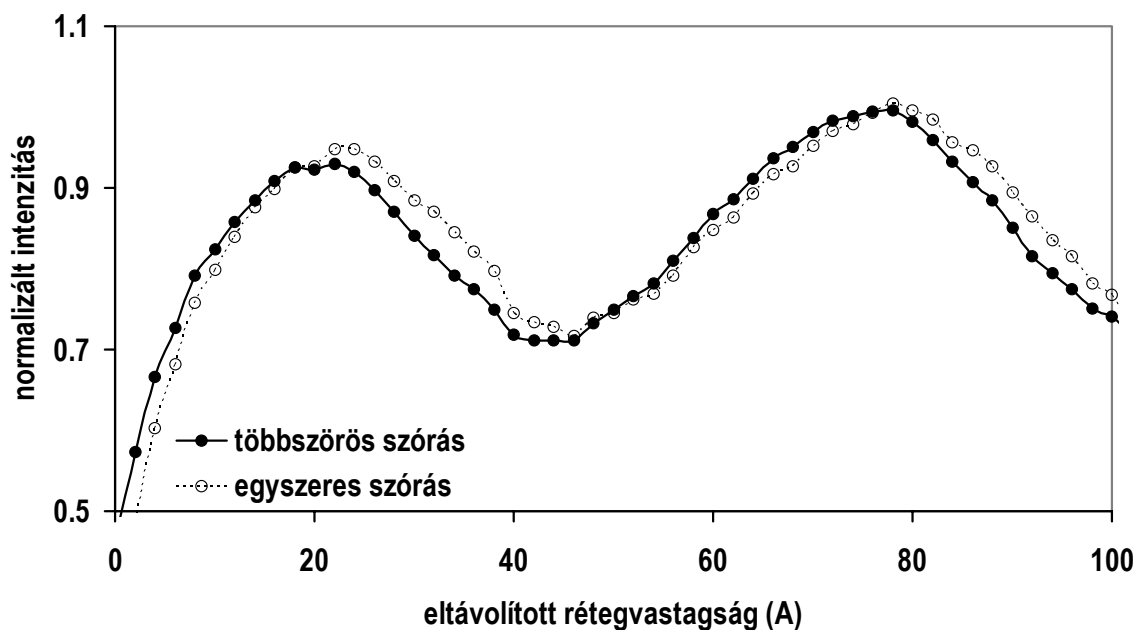
Az ideális mintán végzett rugalmas csúcs profilok szimulációi közül a 31. ábrán látható a legnagyobb eltérés az egyszeres és többszörös rugalmas szórás számítások között, amikor a mintára merőlegesen belépő elektronnyalábot és 36-48°-os detektálási szöveget szimuláltam. Az intenzitások eltérése ebben az esetben maximum 12%.

Vizsgáljuk meg, hogy az ionkeveredés, azaz a tényleges mérési körülmények figyelembe vétele hogyan változtatja meg a szimulált profilokat. Lássuk, milyen különbséget mutatnak az egyszeres, illetve a többszörös rugalmas szórás számítások. Azt várhatjuk, hogy inhomogén mintában a koncentráció-változások nem olyan élesek, mint az ideális esetben, ezért a két számítás közt az eltérés kisebb. Lássunk erre egy példát, amikor a szimulációban 300 eV-os ionporlasztást tételeztem fel. A 32-35. ábrán 500 eV-os, 1000 eV-os és 1500 eV-os elektron energiákon szimulált profilokat mutatom be, melyekkel megmutatom, hogyan változnak a számított spektrumok az elektron energia változtatásával.



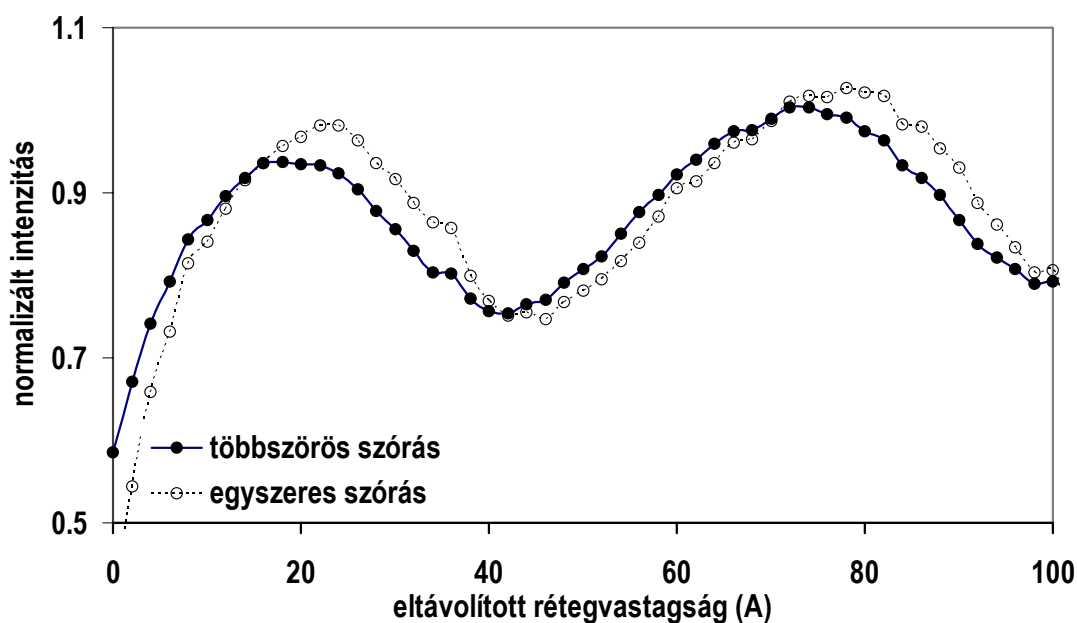
**32. ábra** 300 eV  $Ar^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta szimulált EPES mélységi profilja CMA elektron spektrométeren, 500 eV elektron energián

A 32. ábrán látható spektrumok profilok közt az eltérés elhanyagolható (az intenzitások közötti eltérés minden egyes pontban kevesebb, mint 3% és a görbék alakja is hasonló). Lássuk, hogyan változik ez nagyobb elektron energiákon!



33. ábra 300 eV  $\text{Ar}^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta szimulált EPES mélységi profilja CMA elektron spektrométeren, 1000 eV elektron energián

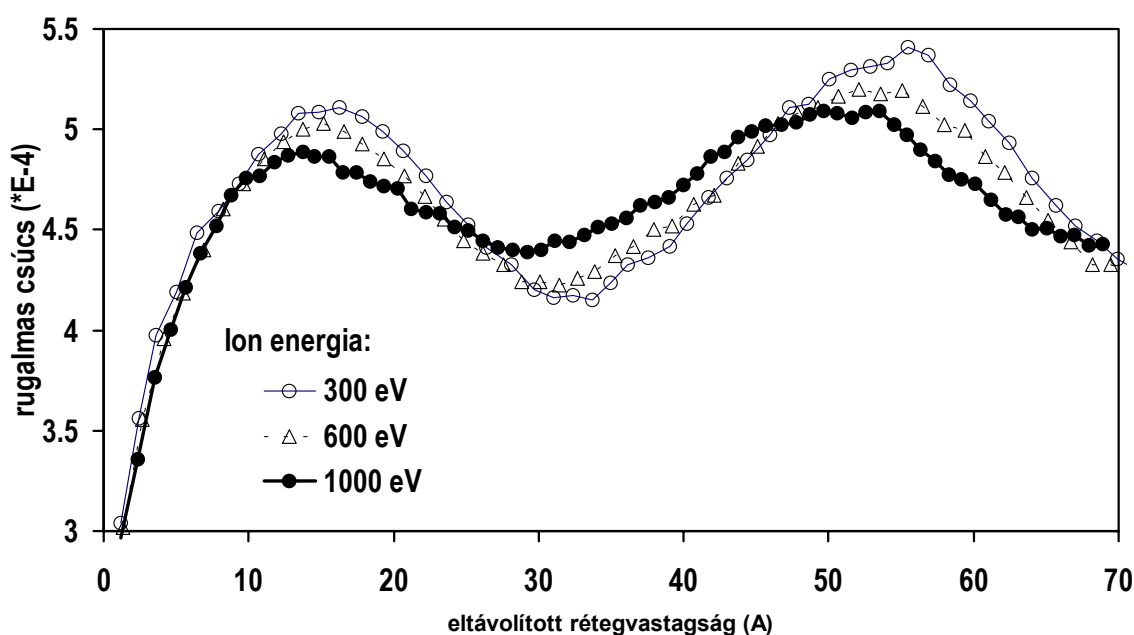
A 33. ábrán látott profilok eltérése sem jelentős. Még a 300 eV-os ionenergia mellett fellépő ionkeveredés is eléggően megváltoztatja az eredeti koncentrációt ahhoz, hogy 1000 eV elektron energián sem látható lényeges különbség a két spektrum között. Az egyszeres és többszörös szórások spektrumának intenzitás különbsége minden pontban kisebb, mint 5%.



34. ábra 300 eV  $\text{Ar}^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta CMA elektron spektrométeren, 1500 eV elektron energián szimulált EPES mélységi profilja

A 34. ábrán látható, hogy a két profil közt a különbség valamelyest nőtt, az intenzitások különbsége azonban mindenütt kisebb, mint 7%.

Vizsgáljuk meg, hogy inhomogén mintáinknál a szimuláció milyen eredményre vezet, miközben az ionenergia változik. Ebben az esetben csak többszörös rugalmas szórás számítok, mely a kísérleteknek is megfelel. A 35. ábra megmutatja, hogy különböző ionenergiákon milyen eredményeket kaptam, amikor 1000 eV-os elektron energiát szimuláltam.



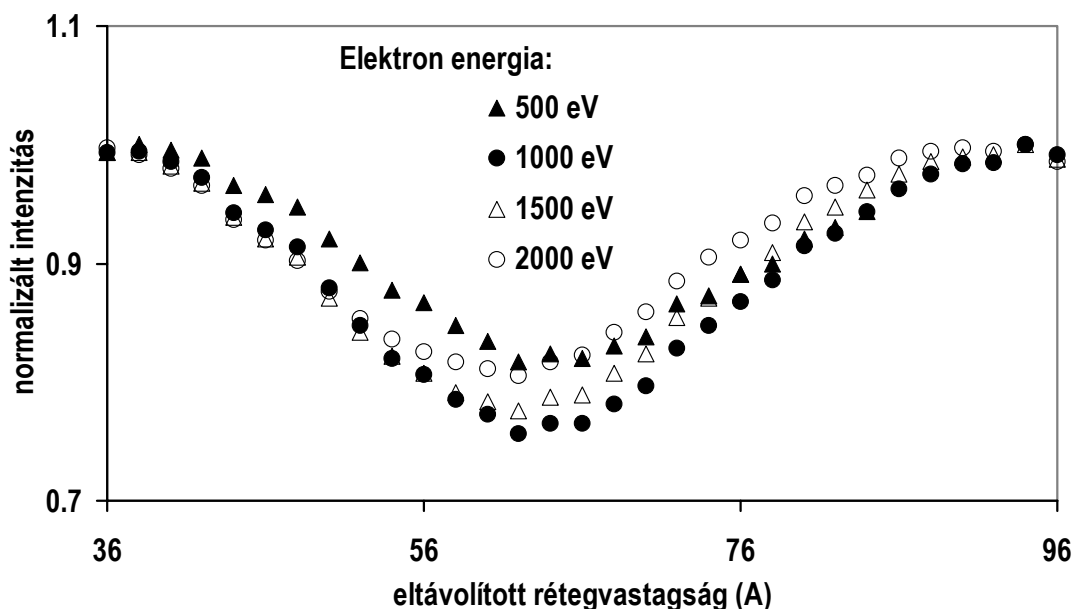
**35. ábra** 300 eV, 600 eV és 1000 eV  $Ar^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minták szimulált EPES mélységi profilja CMA elektron spektrométeren, 1000 eV elektron energián

A 35. ábrán látott eredmények alapján látható, hogy az ionenergia növelésével a profilokban a rugalmas csúcs intenzitások változása egyre csökken. Ezt azzal magyarázhatjuk, hogy minél nagyobb az ionenergia, a rétegek annál jobban összekeverednek, és ekkor a szimuláció a kevésbé éles koncentráció-eloszlást tükrözi.

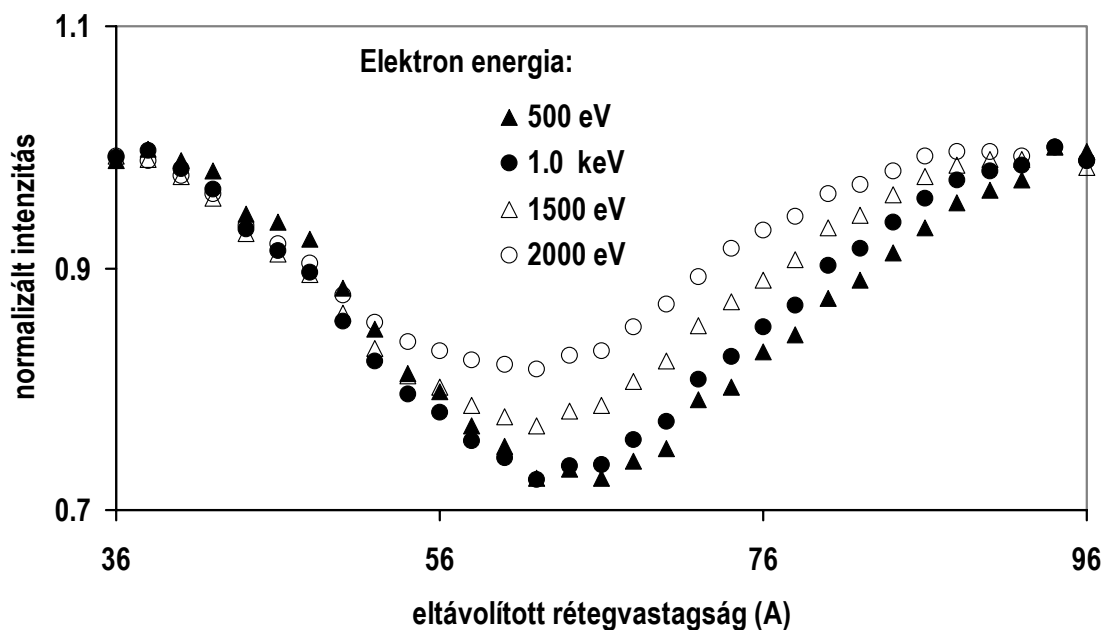
Szimulációs programom könnyen alkalmazható arra, hogy megvizsgáljuk, különböző mérési geometriák esetén hogyan változik a (többszörös szórással) számított rugalmas csúcs változása. A számítások alkalmasak annak a vizsgálatára, hogy milyen paraméterekre érzékeny a mérés. Ha valamilyen paraméterre a mérés érzékeny, a

szimuláció eredménye alapján a legkedvezőbb eset kiválasztható. A legkedvezőbb esetek természetesen nem biztos, hogy a gyakorlat szempontjából elérhetők. A praktikusan elérhető esetek közül a szimuláció alapján javaslatot teszek, hogy melyik a legjobb.

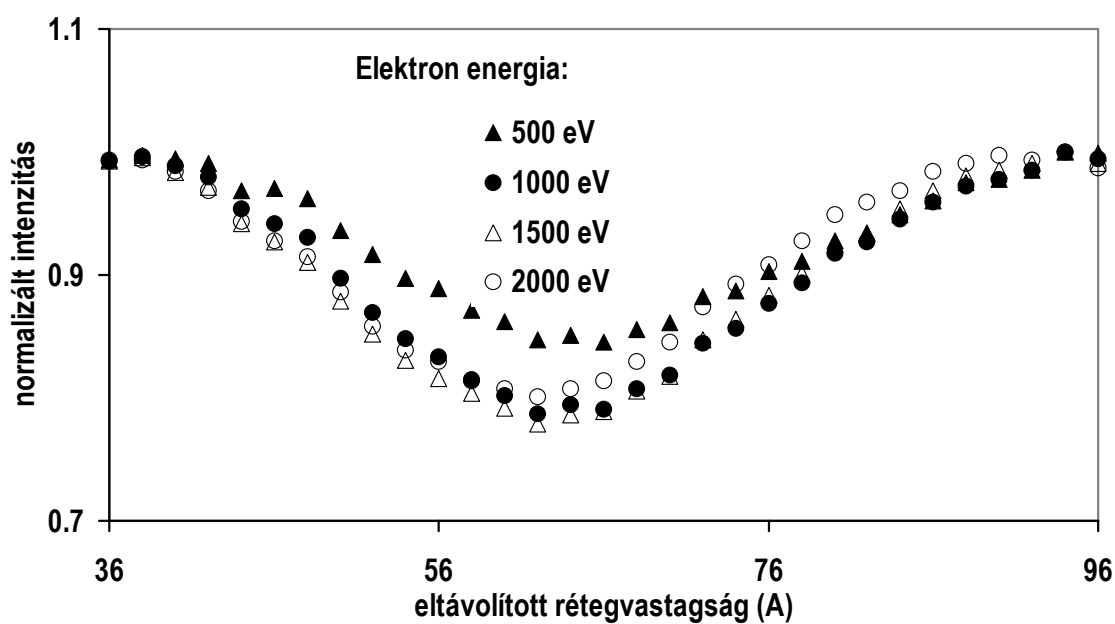
Tekintsünk egy lehetséges kétkomponensű, rétegszerkezetű *Ge-Si* minta *EPES* mélységi profilját néhány primer energiára és néhány geometriai elrendezésre. Célom, hogy az eredmények alapján javaslatot tudjak tenni, hogy milyen energián és geometrián célszerű méréseket végezni. A szimulációban a 600 *eV*-os ionenergiával porlasztott minta koncentráció-eloszlását használtam. A számításokat négy elektron energiára végeztem el: 0.5, 1.0, 1.5 és 2.0 *keV*-re. Négy geometriai elrendezést vizsgáltam. Elsőként lássuk a szokásos *CMA* spektrométernek megfelelő geometriát, ahol az elektron beesési és detektálási szöge a felület normálisához képest rendre  $0^\circ$  és  $42^\circ \pm 6^\circ$ . A következő elrendezés a laboratóriumunkban lévő *DESA 100* -nak felel meg. A beesés szöge változtatható. Attól függően, hogy melyik elektronforrás gerjeszti a mintát, ez  $0^\circ$  vagy  $55^\circ$ . A detektálás szöge pedig mindkét esetben  $19^\circ$ - $31^\circ$  a felület normálisához képest. Végül megvizsgáltam a debreceni *ESA 31* spektrométer elrendezést, ahol a beesési szög  $50^\circ$ , a detektálás pedig  $0^\circ$ - $5^\circ$  a felület normálisához képest. Számítási eredményeimet a következő 36-40. ábra mutatja.



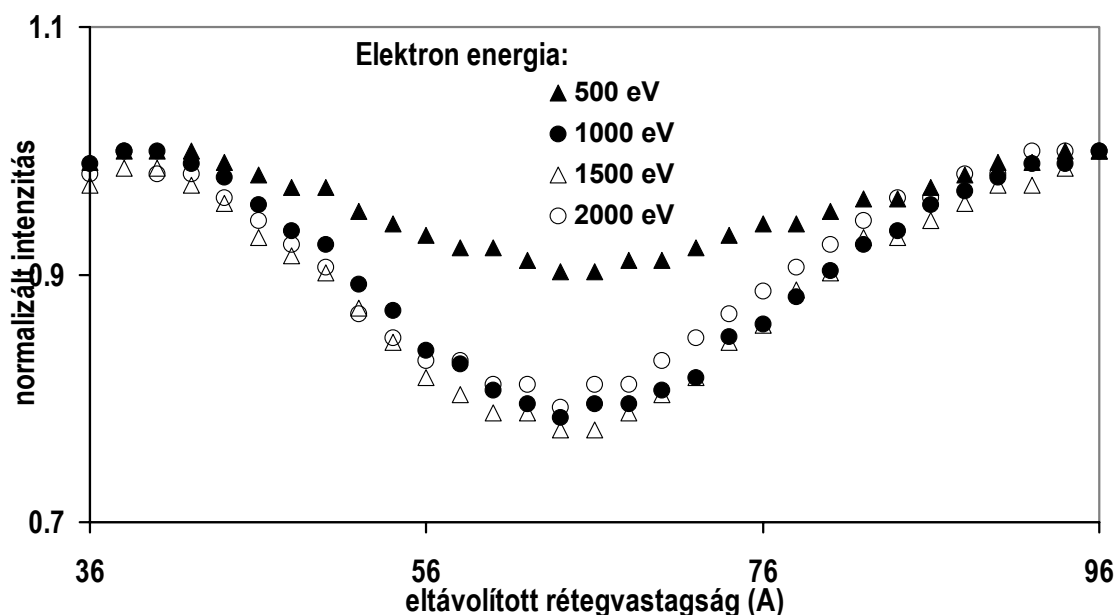
**36. ábra** 600eV  $\text{Ar}^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén *Ge-Si* minta szimulált *EPES* mélységi profiljai *CMA* elektron spektrométeren, 500 eV, 1000 eV, 1500 eV és 2000 eV elektron energián



37. ábra 600eV Ar<sup>+</sup>-ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta szimulált EPES mélységi profiljai DESA elektron spektrométer szembeágyúján 500 eV, 1000 eV, 1500 eV és 2000 eV elektron energián



38. ábra 600eV Ar<sup>+</sup>-ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta szimulált EPES mélységi profiljai DESA elektron spektrométer oldalágyúján 500 eV, 1000 eV, 1500 eV és 2000 eV elektron energián

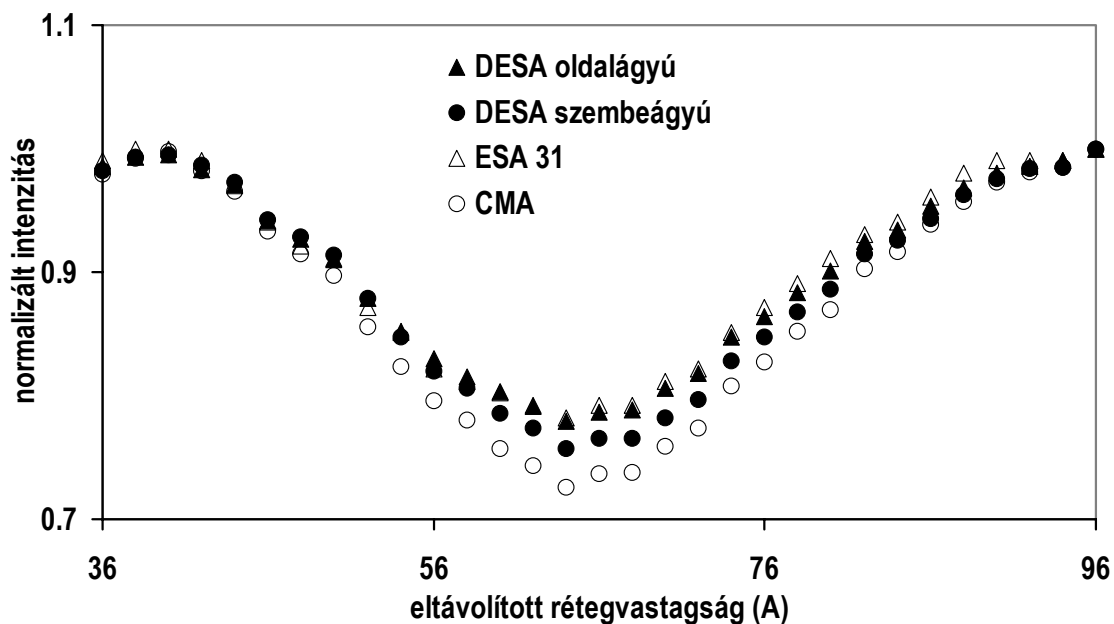


39. ábra 600eV  $Ar^+$ -ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta szimulált EPES mélységi profiljai ESA 31 elektron spektrométer oldalágúján 500 eV, 1000 eV, 1500 eV és 2000 eV elektron energián

Az inhomogén minta esetén a 36-39. ábrán láthatók a négy mérési geometrián szimulált profilok eredményei. Ezeket összevetve láthatjuk, hogy a profilok 1.0 keV energiájú elektron energián a legérzékenyebbek a minta koncentráció-változásra. Ebben az esetben a szimulált intenzitásváltozások nagyok. Megvizsgáltam azt, hogy ha e körül az 1.0 keV körül 0.1-0.2 keV értékkel megváltoztattam az elektron energiáját, a spektrumokban ez milyen változást eredményezett. Azt kaptam, hogy az 1.0 keV-os energiához képest ezek csak kissé térnek el. Az elektron energiájának változtatása a különböző spektrométereken eltérő mértékű változásokat okoz a spektrumokban, ezek a különbségek azonban a mérési bizonytalanságon belül vannak. Megjegyzendő mégis, hogy amikor a DESA 100 spektrométer geometriájával szimuláltam az rugalmas csúcs intenzitásokat, jobb (a koncentráció-változásra érzékenyebb) spektrumot kaptam, amikor a belépő elektron merőleges volt a minta felületére ( $0^\circ$ ), mint amikor a felület normálisával  $55^\circ$ -ot zárt be.

Az ESA 31 spektrométernél pedig azt találtam, hogy 0.5 keV elektron energiánál kaptam a legkevésbé érzékeny profilt, vagyis ezzel a spektrométerrel az adott mintát 0.5 keV elektron energián nem célszerű mérni.

Megvizsgáltam, hogy adott elektron energián (1500 eV-on) melyik mérési geometrián kapok legjobb profilt. A 40. ábra ezt az összehasonlítást mutatja.



**40. ábra** 600eV Ar<sup>+</sup>-ion porlasztás hatására megváltozott anyagi eloszlású, inhomogén Ge-Si minta szimulált EPES mélységi profiljai CMA, DESA 100 és ESA 31 elektron spektrométeren mért 1500 eV elektron energián

Az eredmények alapján megállapíthatjuk, hogy réteges MC programunkat könnyen tudtuk alkalmazni arra, hogy megvizsgáljuk számunkra a gyakorlat szempontjából fontos spektrométerek esetén, hogy milyen energiájú elektronnal célszerű EPES mélységi feltérképezést végezni.



### III. Összefoglalás

Elektronspektroszkópiai módszerek a vizsgált mintáról emittált elektronokat analizálnak. Felületérzékeny elektronspektroszkópiai eszközökkel, röntgen fotoemissziós spektroszkópiával (*XPS*), *Auger* elektron spektroszkópiával (*AES*) a minta valamilyen vastagságú rétege analizálható. *XPS* és *AES* mérések kiértékeléséhez szükség van az átlagos rugalmatlan szabad útossz (*IMFP*) ismeretére.

Rugalmas csúcs elektron spektroszkópiával (*EPES*), valamint a visszaszórt elektron energiaveszteségi spektroszkópiával (*REELS*) *IMFP* értékek, továbbá energiaveszteségi függvények határozhatók meg. Olyan méréseket, melyekből információ nyerhető a minta felületi tartományáról, szokásosan közepes (néhány száz *eV*-os) energiájú elektronokkal végeznek.

A dolgozat célja, hogy egy egyszerű eljárást mutasson be, mellyel elektronspektroszkópiai mérések könnyen, hatékonyan értékelhetők ki. *EPES* és *REELS* mérések kiértékelésére kidolgoztam egy *Monte Carlo* modellt, amely alkalmas homogén és inhomogén közegben az elektron transzport leírására. A rugalmas és rugalmatlan szórásokat független eseményekként kezelem. A rugalmas szórást a táblázati formában elérhető rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszeti adataiból és a minta ismert anyagi sűrűségéből számítom. A rugalmatlan szórást a felületi és térfogati energiaveszteségi függvényekkel írom le. Az energiaveszteségi függvényeket *Drude-Lindhard* típusú függvényekkel állítom elő, melyek szabad paramétereit a kísérleti spektrumokhoz illeszttem. A réteges leírást homogén mintára is alkalmaztam, tömbi és felületi tartományok definiálásával. Mind a mintában, mind a mintán kívüli felületi gerjesztéseket a felületi rétegen belül számítottam. A modellnek megfelelő számítógépes programot elkészítettem. *MC* programommal *polySi*, *amorfGe* és mikrokristályos *Sn* minták mért *REELS* spektrumait szimuláltam a felületi veszteségek figyelembe vételével. Módszeremmel a szimulációs eredmények és a kísérleti *REELS* görbék jól illeszkedtek. A szimulációban az illesztési paraméterek a veszteségi függvények alakja, és a felületi gerjesztés intenzitása volt. *MC* szimulációs eljárásom alkalmas arra, hogy különböző mérési körülmények közt is illesszem ezeket a paramétereket. Különböző elektron energiákra és különböző elektron spektrométerek geometriájára végeztem el az illesztéseket. Az összes *Si*, *Ge* és *Sn* mérést tudtam illeszteni a megfelelő (*Si*, *Ge* vagy *Sn*) veszteségi függvényekkel, függetlenül az elektronenergiától és a mérési geometriától. Ezen

eredmény alapján a meghatározott veszteségi függvényeknek tényleges fizikai jelentése van.

A szimulációban külön kezeltem a felületi veszteségeket. A felületi veszteségek leírására szokásosan alkalmazott fizikai paraméter a felületi gerjesztési paraméter (*SEP*). A mérések szimulációjakor a mérési körülmények miatt ismert modellt alkalmazhattam a *SEP* meghatározására. Mivel *MC* programom mind a rugalmasan visszaszórt elektronokat, mind a felületi veszteségeket számolja, a *SEP* értékeket könnyen meghatároztam. Az így nyert *Si* és *Ge* minták felületi gerjesztési paraméter (*SEP*) értékeit összehasonlítottam Werner és Gergely adataival. A három modell értékei jól egyeztek.

*SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* tényleges *IMFP* adatait határoztam meg *EPES* módszerrel, *Monte Carlo* programom alkalmazásával. Megmutattam, hogy a mért rugalmas csúcs intenzitásokat felületi gerjesztésre korrigálni kell. A korrekciót Chen képlete és anyagi paraméter adatai, továbbá Kwei anyagi paraméter adatai alapján végeztem el. A *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* rétegek *IMFP* adatait meghatároztam a *TPP-2M* formula alapján is.

Adott kétkomponensű, rétegsoros *Ge-Si* minták rugalmas csúcs feltérképezését szimuláltam *MC* programommal különböző elektron beesési és detektálási geometrián és elektron energián. A határrétegen az ionkeveredést *TRIM* szimulációval vettem figyelembe. A szimulált rugalmas csúcs intenzitások a mérési geometria és az elektron energia függvényében változtak a mélységi feltérképezés során. A szimulációs eredmények alapján *CMA*, *ESA 31* és *DESA 100* elektron spektrométerekre megállapítottam az optimális mérés elektron energiáját. Megmutattam továbbá, hogy a mérési geometriák függvényében hogyan változik a rugalmas csúcs mélységi eloszlás.

## **Irodalomjegyzék**

- [1] Seah MP in Practical Surface Analysis by Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy, ed. Briggs D and Seah MP, J. Wiley, Chichester, 1983, p.181.
- [2] Werner WSM, *Surf. Interface Anal.* **31** (3) 141.
- [3] Gergely G, *Progr. Surf. Sci.* **71** (2002) 31.
- [4] Neufeld J, Ritchie RH, *Phys. Rev.* **98** (1955) 1632.
- [5] Dubus A, Jablonski A, Tougaard S, *Progr. Surf. Sci.* **63** (2000) 135.
- [6] Lindhard J, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **28** (1954) 1.
- [7] Ritchie RH, Howie A, *Phil. Mag.* **36** (1977) 463.
- [8] Tougaard S, Sigmund P, *Phys. Rev. B* **25** (1982) 4452.
- [9] Yubero F, Tougaard S, Elizalde E, Sanz JM, *Surf. Interface Anal.* **20** (1993) 719.
- [10] Fuentes GG, Elizade E, Yubero F, Sanz JM, *Surf. Interface Anal.* **33** (2002) 230.
- [11] Tilinin IS, Jablonski A, Werner WSM, *Progr. Surf. Sci.* **52** (1997) 193.
- [12] Chen YF, *J. Vac. Sci. Technol A* **13** (1995) 265.
- [13] Tőkési K, Varga D, Kövér L, Mukoyama T, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **76** (1995) 427.
- [14] Ding ZJ, *Phys Rev. B* **66** (2002) 85411.
- [15] Staib P, *J. Phys. E. Sci. Instrum.* **10** (1972) 914.
- [16] Kover L, Varga D, Cserny I, Toth J, Tokesi K, *Surf. Interface Anal.* **19** (1992) 9.
- [17] Gurban S, Gergely G, Menyhard M, Adam J, Adamik M, Daroczi C, Toth J, Varga D, Csik A, Gruzza B, *Surf. Interface Anal.* **34** (2002) 206.
- [18] G. Gergely, M. Menyhard, S. Gurban, A. Sulyok, J. Torth, D. Varga, S. Tougaard, *Surf. Interface Anal.* **33** (2002) 410.
- [19] Werner WSM, Smekal W, Tomasik C, Stori H, *Surf. Sci.* **486** (2001) L461.
- [20] Chen YF, *Surf. Sci.* **519** (2002) 115.
- [21] Kwei CM, Wang CY, Tung CJ, *Surf. Interface Anal.* **26** (1998) 682.
- [22] Born M, Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Z Phys* **38** (1926) 803.
- [23] Niedrig N, *Scanning* **1** (1978) 17.
- [24] Reimer L, Loedding B, *Scanning* **6** (1984) 128.
- [25] Bauer E, Browne HN, McDowell MRC (szerk.), Proc. 13th Int. Conf. Atomic Collision Processes, London 1963, North-Holland, (1994).
- [26] Fink M, Yates A, *At. Data* **1** (1970) 385.
- [27] Fink M, Ingram J, *At. Data* **4** (1972) 129.

- [28] Gregory D, Fink M, *At. Data* **14** (1974) 39.
- [29] Riley ME, MacCallum CJ, *At. Data* **15** (1975) 443.
- [30] Mott NF, Massey HSW, *The Theory of Atomic Collisions*, 3rd. ed. (Oxford: Oxford University Press, 1965).
- [31] Ichimura S, Aratama M, Shimizu S, *J. Appl. Phys.* **51** (1980) 2853.
- [32] Jablonski A, Gergely G, *Scanning* **11** (1989) 29.
- [33] Czyweski Z, O'Neil D, MacCallum CJ, Romig A, Joy DC, *J. Appl. Phys.* **68** (1990) 3066.
- [34] Jablonski A, *Phys. Rev. B* **43** (1991) 7546.
- [35] Jablonki A, Salvat, F, Powell CJ, NIST Electron Elastic-Scattering Cross section database, Version 3.0, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2002).
- [36] Salvat F, Mayol R, *Comput. Phys. Comm.* **62** (1991) 65.
- [37] Jablonski A, Powell CJ, *Surf. Sci.* **463** (2000) 29.
- [38] Sevier KD, *Low energy electron spectrometry*, Wiley Interscience, New York, 1927.
- [39] Hedin L, Lundqvist S, *Phys. Stat. Sol.* **23** (1969) 1.
- [40] Overhauser AW, *Phys. Rev.* **83** (1971) 1888.
- [41] Penn DR, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5428.
- [42] Tougaard S, Kraaer J, *Phys. Rev. B* **43** (1990) 1651.
- [43] Tougaard S, *Surf. Interface Anal.* **25** (1997) 137.
- [44] Palik ED, *Handbook of Optical Constants of Solids I, II* (Academic Press, New York, 1985, 1991).
- [45] Rigby M, Smith EB, Wakeham WA, Maitland, *The Forces Between Molecules* (Clarendon, Oxford, 1986).
- [46] Quinn JJ, *Phys. Rev.* **126** (1962) 1453.
- [47] Lundqvist BI, *Phys. Stat. Sol.* **32** (1969) 273.
- [48] Ritchie RH, Garber FW, Nakai MY, Birkhoff RD, *Advances in Radiation Biology* (Academic Press, New York, 1969), Vol 3, p. 1.
- [49] Kleinman L, *Phys Rev. B* **3** (1971) 2982.
- [50] Shelton JC, *Surf. Sci.* **44** (1974) 305.
- [51] Penn DR, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5248.
- [52] Penn DR, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **9** (1976) 29.
- [53] Ashley JC, Tung CJ, Ritchie RH, *Surf. Sci.* **81** (1979) 409.
- [54] Penn DR, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 482.

- [55] Penn DR, Clark CW, Powell CJ, Fulop T, Tanuma S, *Ultramicroscopy* **69** (1997) 69.
- [56] Tanuma S, Powell CJ, Penn DR, *Surf. Interface Anal.* **11** (1988) 577.
- [57] Tanuma S, Powell CJ, Penn DR, *Surf. Interface Anal.* **17** (1991) 911.
- [58] Tanuma S, Powell CJ, Penn DR, *Surf. Interface Anal.* **17** (1991) 927.
- [59] Tanuma S, Powell CJ, Penn DR, *Surf. Interface Anal.* **20** (1993) 77.
- [60] Tanuma S, Powell CJ, Penn DR, *Surf. Interface Anal.* **21** (1988) 165.
- [61] Bethe H, *Ann. Physik* **5** (1930) 325.
- [62] Tanuma S, Powell CJ, Penn DR, *Surf. Interface Anal.* **25** (1997) 25.
- [63] Tougaard S, Chorkendoff I, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 6570.
- [64] Tougaard S, *Surf. Interface Anal.* **11** (1988) 453.
- [65] Raether H, *Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons*, Springer Tracts in Modern Physics vol. 88, Springer, Berlin, 1980.
- [66] Ritchie RH, *Phys. Rev. B* **106** (1957) 874.
- [67] Jensen H, *Z. Phys.* **106** (1937) 620.
- [68] Ehrenreich H, Philipp HR, *Phys. Rev.* **128** (1962) 1622.
- [69] Ritchie RH, Marusak AL, *Surf. Sci.* **4** (1966) 234.
- [70] Bennett AJ, *Phys. Rev. B* **1** (1970) 203.
- [71] Levinson HJ, Plummer EW, Feibelman PJ, *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979) 952.
- [72] Tsuei K-D, Plummer EW, Feibelman PJ, *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 2256.
- [73] Tsuei LD, Plummer EW, Liebsch A, Kempa K, Bakshi P, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1989) 44.
- [74] Tsuei LD, Plummer EW, Liebsch A, E. Pehlke, Kempa K, Bakshi P, *Surf. Sci.* **247** (1991) 302.
- [75] Contini R, Layet JM, *Solid State Commun.* **64** (1987) 1179.
- [76] Nagatomi T, Shimizu R, Ritchie RH, *Surf. Sci.* **419** (1999) 158.
- [77] Werner WSM, Smekal W, Stori H, *Surf. Interface Anal.* **31** (2001) 475.
- [78] Chen YF, Kwei CM, *Surf. Sci.* **364** (1996) 131.
- [79] Ding ZJ, Shimizu R, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 14128.
- [80] Gergely G, *Surf. Interface Anal.* **3** (1981) 201.
- [81] Gergely G, Barna A, Sulyok A, Jardin C, Gruzza B, Bideux L, Robert C, Toth J, Varga D, *Vacuum* **54** (1999) 209.
- [82] Tanuma S, Ichimura S, Goto K, *Surf. Interface Anal.* **30** (2000) 212.
- [83] Jablonski A, Mrozek P, Gergely G, Menyhard M, Sulyok A, *Surf. Interface Anal.* **6** (1984) 291.

- [84] Jablonski A, *Surf. Sci.* **188** (1987) 164.
- [85] Dolinski W, Nowicki H, Mroz S, *Surf. Interface Anal.* **11** (1988) 229.
- [86] Lesiak B, Jablonski A, Prussak Z, Mrozek P, *Surf. Sci.* **223** (1989) 213.
- [87] Jablonski A, Lesiak B, Gergely G, *Physica Scripta* **39** (1989) 363.
- [88] Lesiak B, Jablonski A, Kosinski A, Kövér L, Tóth J, Varga D, Cserny I, Asztalos-Kiss B, Gergely G, Hasik M, Drelinkiewicz A, Wenda A, *Surf. Sci.* **507** (2002) 900.
- [89] Powell CJ, Jablonski A, *J. Phys. and Chem. Ref. Data* **28** (1999) 19.
- [90] Jablonski A, Jansson C, Tougaard S, *Phys. Rev.* **B 47** (1993) 7420.
- [91] Werner WSM, Tilinin IS, Hayek M, *Phys. Rev.* **B 50** (1994) 4819.
- [92] Beilschmidt H, Tilinin IS, Werner WSM, *Surf. Interface Anal.* **22** (1994) 120.
- [93] Powell CJ, *Phys. Rev.* **175** (1968) 972.
- [94] Toufterup AL, *Phys. Rev.* **B 32** (1985) 2808.
- [95] Pázsit I, Chakarova R, *Phys. Rev.* **B 50** (1994) 13953.
- [96] Vicanek M, *Surf. Sci.* **440** (1999) 1.
- [97] Konkol A, Menyhard M, *Surf. Interface Anal.* **25** (1997) 699.
- [98] Tőkési K, Takeshi Mukoyama, Bulletin of the Institute for Chemical Research, Kyoto University, **72** (3-4) (1994).
- [99] Sulyok A, Elektron energia veszteségi spektroszkópia alkalmazása, doktori értekezés, Budapest, 1989.
- [100] Tokesi K, Kover L, Varga D, Toth J, Mukoyama T, *Surf. Rev. Lett.* **4** (1997) 955.
- [101] Berényi Z, Tőkési K, Tóth J, Burgdörfer J, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **129** (2003) 299.
- [102] Tokesi K, Nemethy L, Kover L, Varga D, Mukoyama T, *J. Appl. Phys.* **79** (1996) 3763.
- [103] Horiguchi S, Suzuki M, Kobayashi T, Yoshino H, Sakakibara Y, *Appl. Phys. Lett.* **39** (1981) 15.
- [104] Kwei CM, Tsai SS, Tung CJ, *Surf. Sci.* **473** (2001) 50.
- [105] NIST Electron Elastic-Scattering Cross sections database RSD 64, Version 2.0, NIST Gaithersburg, MD, 2001.
- [106] Dubot P, Jousset D, Pinet V, Pellerin F, Langeron JP, *Surf. Interface Anal.* **12** (1988) 99.
- [107] Yoshikawa H, Shimizu R, Ding ZJ, *Surf. Sci.* **261** (1992) 403.
- [108] Yoshikawa H, Tsukamoto T, Shimizu R, Crist V, *Surf. Interface Anal.* **18** (1992) 757.

- [109] Nagatomi T, Ding ZJ, Shimizu R, *Surf. Sci.* **359** (1996) 163.
- [110] Wang JP, Tung CJ, Chen YF, Kwei CM, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **108** (1996) 331.
- [111] Menyhard M, Orosz GT, Sulyok A, International Workshop on the Inelastic mean free path IMFP 2002, Book of Abstract 17.
- [112] Gergely G, Menyhard M, *Acta Tech. Hung.* **80** (1975) 309.
- [113] Werner WSM, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114-116** (2001) 363.
- [114] Chen YF, *Surf. Sci.* **345** (1996) 213.
- [115] Jablonski A, *Surf. Sci.* **151** (1985) 166.
- [116] Rather H, Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings (Springer –Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1988).
- [117] Barna A, Menyhard M, *Surf. Interface Anal.* **24** (1996) 476.
- [118] Zalar A, *Thin Solid Films* **124** (1985) 223.
- [119] Barna A, Sulyok A, Menyhard M, *Surf. Interface Anal.* **19** (1992) 77.
- [120] Menyhard M, Konkol A, Gergely G, Barna A, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **68** (1994) 653.
- [121] Biersack JP, *Nucl. Instrum. Methods B* **27** (1987) 21.
- [122] Sekine T, Hirata K, Mogami A. *Surf. Sci.* **125** (1983) 565.

### ***Publikációs jegyzék***

- [S1] **Orosz GT**, Sulyok A, Gergely G, Gurban S, Menyhard M, *Microsc. Microanal.* **9** (2003) 4.
- [S2] **Orosz GT**, Gergely G, Gurban S, Menyhard M, Toth J, Varga D, Tougaard S, *Vacuum* **71** (2003) 147.
- [S3] Jung R, Lee JC, **Orosz GT**, Sulyok A, Zsolt G, Menyhard M, *Surf. Sci.* **1-3** (2003) 153.

## TÉZISPONTOK

### 1. tézis:

Kidolgoztam egy *Monte Carlo* modellt, amely alkalmas homogén és inhomogén közegben elektron transzport leírására. A modellnek megfelelő szimulációs programot elkészítettem többkomponensű homogén, valamint réteges minták vizsgálatára.

### 2. tézis:

Jó egyezéssel rekonstruáltam *polySi*, *amorfGe* és mikrokristályos *Sn* minták kísérleti *REELS* spektrumait *Monte Carlo* szimulációval, a felületi veszteségek figyelembe vételével. Ennek során meghatároztam a *Si*, *Ge* és *Sn* minták felületi és térfogati energiaveszteségi függvényeit 0-50 eV tartományban.

### 3. tézis:

*Monte Carlo* modellemmel *Si* és *Ge* minták felületi gerjesztési paraméter (*SEP*) értékeit határoztam meg, melyeket összehasonlítottam Werner és Gergely adataival. A három modell értékei jól egyeztek.

### 4. tézis:

*SiO<sub>2</sub>* / *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* / *SiO<sub>2</sub>* / *Si* mintán mért rugalmas csúcsok szimulálásával határoztam meg *SiO<sub>2</sub>* és *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* *IMFP* értékeket. A felületi veszteség korrekciójára Chen adatait használtam. Kimutattam, hogy szükséges ez a korrekció.

### 5. tézis:

*Ge-Si* több rétegű minták *EPES* mélységi feltérképezésének számítógépes szimulálását végeztem *CMA*, *ESA 31* és *DESA 100* spektrométerekre. Az egyes mérési geometriákra megállapítottam az optimális mérés elektron energiáját. Megmutattam a mérési geometriák eredményeként a mélységi profil változását.



## Theses

### 1<sup>st</sup> point

I developed a *Monte Carlo* model that is suitable for describing electron transport in a multi-component homogeneous and inhomogeneous material. I prepared a software according to the model above.

### 2<sup>nd</sup> point

I simulated measured *REELS* spectra of *polySi*, amorphous *Ge* and microcrystalline *Sn* samples with good agreement using the *Monte Carlo* program, considering surface losses. The simulation provided surface and bulk energy loss functions of *Si*, *Ge* and *Sn* samples in the 0-50 eV energy range.

### 3<sup>rd</sup> point

I determined the surface excitation parameter (*SEP*) of *Si* and *Ge* samples and compared those to the data of Gergely and Werner. The values obtained by the three different models agreed well.

### 4<sup>th</sup> point

I determined the *IMFP* values of *SiO<sub>2</sub>* and *Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>* using *EPES* method with *Si* reference sample. I made surface correction on the measured elastic peak intensity of *Si*, using material parameters and formula of Chen. I showed that this surface correction is necessary.

### 5<sup>th</sup> point

I simulated *EPES* depth profiling measurements on *Ge-Si* multilayered samples for the geometries of *CMA*, *ESA 31* and *DESA 100* spectrometers. For each geometry I determined the optimum electron energy for the measurements. I evaluated differences in the calculated elastic peak profiles due to the different measurement geometries.

## **Köszönetnyilvánítás**

Ezúton szeretnék köszönetet mondani mindazoknak, akik doktori értekezésem elkészítéséhez kapcsolódó munkámban segítettek. Mindenekelőtt köszönöm Dr. Menyhárd Miklós témavezetőm odaadó segítőkézségét, melyet nap, mint nap tapasztalhattam. Megteremtette a szükséges munkakörülményeket és anyagi forrásokat. Bármely kérdésemre, kérésemre nagy figyelemmel tekintett, és mindenben segített, akár a munka, akár más területen. Hálás vagyok, hogy az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet Felületfizikai Osztályán végezhettem el munkámat, élvezve az Intézet munkatársainak segítőkézségét és kiemelkedő szakmai tudását. Köszönöm az Intézet minden munkatársának a segítségét. Kiemelem közvetlen munkatársaim folyamatos segítségét. Dr. Sulyok Attila fáradhatatlanul támogatott szakmai és emberi tanácsaival, és segítségért bármikor fordulhattam Hozzá. Dr. Gergely György szakmai tudását, tapasztalát osztotta meg velem. Szakmailag folyamatosan segített, és támogatott abban, hogy a doktori képzéshez kapcsolódó munkámban segítséget kaphassak.

Köszönöm, hogy a Veszprémi Egyetem lehetővé tette, hogy Dr. Méray László szomorú halála után Dr. Szalai István az egyetemen konzulensem volt, és segítette, hogy az elkezdett képzést az Egyetemen befejezhessem.

## Melléklet

A *Monte Carlo* szimulációs eljárások olyan véletlenszám sorozatot igényelnek, amelyek eloszlása megfelel adott fizikai mennyiségek eloszlásának. Ilyen véletlenszám sorozatot előállíthatunk az

$$[R]_0^1 = \int_0^{x'} f(x) dx \quad (M.1)$$

egyenlet  $x'$ -re történő megoldásával, ahol  $f(x)$  eloszlás a követni kívánt valószínűségi függvény,  $[R]_0^1$  pedig egyenletes eloszlású véletlenszám sorozat, ami a számítógép rutinokban alapszolgáltatás.

Jelölje  $F(x)$  az  $f(x)$  primitív függvényét, azaz:

$$F(x) = \int f(x). \quad (M.2)$$

(M.1) és (M.2) egyenletekből következik, hogy a megoldandó feladat

$$[R]_0^1 = F(x'). \quad (M.3)$$

Ilyen típusú egyenleteket kell megoldani (II.A.2) és a (II.A.4.) egyenletekben, ahol  $x'$  a  $\Theta_{sz}$  polár koordinátát, illetve  $E_{sz}$  energiaveszteséget,  $f(x)$  pedig a rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszeti, illetve az energiaveszteségi függvényt jelentik.  $x'$  értékének megkeresése lehetséges, de lassú megoldás. Gyors eljárás az, ha képezzük a  $G^{-1}(x) = F(x)$  inverz integrál függvényt, mellyel  $x'$  közvetlenül kiszámítható:

$$G([R]_0^1) = x'. \quad (M.4)$$

$f(x)$  számítógépes ábrázolása adott  $x_i$  pontokban történik, az olyan  $x_j$  pontokban pedig, amelyek az  $x_i$  és az  $x_{i+1}$  pontok közé esnek, ahol  $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ ,  $f(x_j)$  interpolációval számítható.

(M.3) és az (M.4) egyenletek inverz integrálfüggvény megoldását jelentik  $x$ '-re, ezért az  $f(x)$ -ben lineáris interpoláció  $F(x)$ -ben másodfokú interpolációt jelent, mégpedig úgy, hogy  $F(x)$ -nek  $x_j$  pontjában teljesüljön, hogy

$$F(x_j) = 0.5 * a_j * x_j^2 + b_j * x_j + c_j. \quad (M.5)$$

Ugyanezekkel az  $a_j$  és  $b_j$  együtthatókkal felírható másik két egyenlet is  $F(x_i)$ -re:

$$F(x_i) = 0.5 * a_j * x_i^2 + b_j * x_i + c_j \quad (M.6)$$

(M.6) egyenletből  $a_j$  és  $b_j$  paramétert meg tudom határozni, (M.7) egyenletből pedig  $c_j$  együttható kiszámítható.

Amennyiben a másodfokú függvény  $a$ ,  $b$  és  $c$  együtthatóit ismerem, tetszőleges  $F(x_j)$  értékre ki tudom számítani  $x_j$  értékét. A másodfokú függvény két gyöke közül a pozitív a megfelelő, mivel az integrálfüggvény monoton függvény, melyre érvényes, hogy  $F(x_j) \geq F(x_i)$  mindenütt.

Az inverz integrálok pontonkénti kiszámítása egyszer, a szimuláció elején történik, és utána már egyszerű interpolációval működik a számolás. Ez a módszer egy gyors eljárást biztosít a kívánt eloszlású számok generálására.