

TASSAレポート # 6(12-3-95)

TPP-2M式による電子の非弾性平均自由行程の推定法

1. 範囲 本レポートはTPP-2M式を用いた固体中における電子の非弾性平均自由行程の計算法について述べたものである。
2. 意義
 2. 1 電子の非弾性平均自由行程(IMFP)は対象物質の種類, 観測する電子のエネルギーによって異なる. TPP-2M式を用いれば, IMFPの物質とエネルギーに対する依存性を知ることができる.
 2. 2 電子の非弾性平均自由行程(IMFP)は有効減衰長(EAL), 脱出深さ(ED), DDF (Depth Distribution Function) の計算の基礎となる物理量である.
 2. 3 この記述の適用によりなにか問題が生じて, それはすべて適用者の責任に帰するものである.
3. 用語
 3. 1 電子の非弾性平均自由行程(IMFP)とは固体中において, 電子が2つの非弾性散乱間に進む距離. 従って, 弾性散乱がある場合は2つの非弾性散乱間の直線距離ではなく, 電子が実際に移動した総距離になる.
 3. 2 関連用語
有効減衰長(EAL), 脱出深さ(ED), DDF (Depth Distribution Function), バンドギャップエネルギー
4. 参考文献
 4. 1 S. Tanuma, C. J. Powell, D. R. Penn, *Surface and Interface Analysis*, 21, 165 (1994).
 4. 2 TASSAレポート
バンドギャップエネルギーの測り方 (予定)
5. 適用範囲
 5. 1 適用エネルギー範囲
50eV以上2000eV以下. ただし, 50-200eVの範囲の正確さはそれ以上のエネルギー領域に比べて落ちる. 200eV以上では誤差は約10%程度と推定.
 5. 2 適用物質

固体として存在する元素, 無機化合物, 有機化合物など. 水にも適用可.

5. 3 AES, XPSの定量分析への適用法については別途定める.

6. IMFPの計算手順

6. 1 必要とする物理量.
 - 1) 原子量または分子量: A_w
 - 2) 1原子または1分子あたりの価電子数: N_v
 - 3) 密度 (g/cm^3): ρ
 - 4) 自由電子プラズモンエネルギー: E_p (eV)
 次式により計算

$$E_p = 28.8 \left(\frac{N_v \rho}{A_w} \right)^{1/2}$$

- 5) バンドギャップエネルギー E_g (eV)

導電性物質: 0eV

半導体: ~5eV程度

不導体: 5~10eV程度

参考: 志水隆一, 吉原一紘 編, "ユーザーのための実用オージェ電子分光法" (共立出版, 1989) 付録表8

6. 2 価電子数 N_v の求めかた

最外殻のs, p電子の総数. 結合に関与するd軌道電子は含める.

- 1) 例 元素

Al: 3 (3s², 3p¹), Ti: 4 (3d², 4s²),

Ag: 11 (4d¹⁰, 5s¹)

- 2) 例 無機化合物

酸化アルミニウム: 24個

$$\text{Al} 3 \times 2 + \text{O} 6 \times 3 = 24$$

- 3) 有機化合物

ポリスチレン: 40個

$$\text{C} 4 \times 8 + \text{H} 1 \times 8 = 40$$

6. 3 TPP-2M式

IMFP値は以下のTPP2M式で計算する.

$$\lambda = \frac{E}{E_p^2 [\beta \ln(\gamma E) - C/E + D/E^2]} \text{ (\AA)}$$

$$\beta = -0.10 + \frac{0.944}{(E_p^2 + E_g^2)^{1/2}} + 0.069 \rho^{0.1}$$

$$\gamma = 0.191 \rho^{-0.50}$$

$$C = 1.97 - 0.94 U$$

$$D = 53.4 - 20.8 U$$

$$U = \frac{N_v \rho}{A_w} = \frac{E_p^2}{829.4}$$

6.4 計算例

アルミニウム，ポリスチレン，二酸化ケイ素についての計算結果を参考のために図1に示す。また，計算に用いた各種の定数を表1にしめす。

表1. 計算に用いた定数

物質	ρ (g/cm ³)	A_w	N_v	E_g (eV)
Al	2.7	26.98	3	0.0
PS*	1.05	104.2	40	4.5
SiO ₂	2.19	60.08	16	9.1

*ポリスチレン

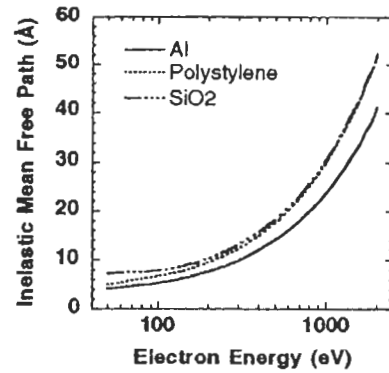


図1. アルミニウム，ポリスチレン，二酸化ケイ素のIMFPのエネルギー依存性.