

## شناسایی نانولایه‌ها با طیف‌سنجی افت انرژی الکترون بازتابی، مطالعه

موردی  $\text{SrTiO}_3$ جمیله دریس<sup>۱</sup>، شاکر حاجتی\*<sup>۱،۲</sup>

گروه فیزیک، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

پژوهشکده نیمه‌هادی‌ها، پژوهشگاه مواد و انرژی، کرج، ایران

دریافت: ۱۳۹۴/۱۲/۱۰ ویرایش نهائی: ۱۳۹۶/۰۱/۱۲ پذیرش: ۱۳۹۶/۰۲/۱۱

## چکیده

با تکنیک طیف سنجی افت انرژی الکترون بازتابی (REELS)، در انرژی کم می‌توان خواص الکترونیکی لایه‌های نازک و نانو ساختارها و ساختار الکترونی سطح را تعیین کرد. در این مقاله، با استفاده از سطح مقطع ناکشسان تجربی REELS به دست آمده به روش توگارد-چورکن دورف، تابع دی الکترونیک تیتانیت استرانسیم با روش یورو-توگارد تعیین می‌شود. سطح مقطع تئوری با توافق خوبی با تجربی در انرژی ۱۴۲۳ الکترون ولت و زاویه ورودی و خروجی  $35^\circ$ ،  $15^\circ$  به دست آمد. علاوه بر این، توزیع زاویه‌ای پارامتر تحریک پذیری سطح برای این بلور در انرژی‌های ۱۰۰۰، ۱۴۲۳، ۲۰۰۰، ۲۵۰۰ و ۳۰۰۰ الکترون ولت تعیین شد. در این راستا از تعریف پائولی و توگارد، که به عنوان تغییر در احتمال تحریک پذیری یک الکترون که به واسطه حضور سطح در مقایسه با الکترون در حال حرکت در محیط نیمه بی‌نهایت است، استفاده شد. محاسبه این پارامتر بر پایه سطح مقطع پاشندگی ناکشسان دیفرانسیلی الکترون، به دست آمده از نرم افزار QUEELS، معتبر برای طیف افت انرژی الکترون بازتابی، می‌باشد.

کلیدواژگان: طیف سنجی افت انرژی الکترون بازتابی، تابع دی الکترونیک، پارامتر تحریک پذیری سطح، تیتانیت استرانسیم

## مقدمه

الکترون اشعه ایکس (XPS)°، طیف-سنجی فوتوالکترون فرابنفش (UPS)°، پراش اشعه ایکس (XRD)°، و همچنین تکنیک‌های دیگری وجود دارند که از برانگیختگی غیر ذره‌ای استفاده می‌کنند، مانند میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM). در طیف‌سنجی الکترونی به گسیل و آنالیز الکترون کم انرژی (معمولاً در محدوده ۲۰۰۰-۲۰ الکترون ولت) توجه می‌شود. در گذشته، روش‌های تجربی برای تعیین سطح مقطع

تکنیک‌های زیادی ویژه تحلیل سطح وجود دارند که از برانگیزش ذره‌ای استفاده می‌کنند، مانند: طیف‌سنجی الکترون اوژه (AES)°، طیف‌سنجی افت انرژی الکترون بازتابی (REELS)°، پراش الکترون کم انرژی (LEED)°، طیف‌سنجی پس‌پراکندگی رادرفورد (RBS)° و همچنین تکنیک‌هایی که از برانگیزش توسط فوتون استفاده می‌کنند، مانند: طیف‌سنجی فوتو

\* نویسنده مسئول: Hajati@mail.yu.ac.ir

1- Auger Electron Spectroscopy

2- Reflection Electron Energy Loss Spectroscopy

3- Low Energy Electron Diffraction

4- Rutherford Backscattering Spectrometry

5- X-ray Photoelectron Spectroscopy

6- Ultra Photoelectron Spectroscopy

7- X-ray photoelectron Diffraction

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

می‌کند و تحریک‌پذیری سطح و توده را می‌توان جداگانه بررسی کرد. طیف‌سنجی افت انرژی الکترون بازتابی (REELS) در انرژی کم، دارای حساسیت سطحی بالایی است و قادر است که ساختار الکترونی لایه‌های نازک را از طریق تعیین تابع دی‌الکتریک ( $k$ ,  $\omega$ )، تعیین کند، چون وقتی که الکترون‌های دارای انرژی در سطح جامد حرکت می‌کنند، الکترون‌های برخوردی می‌توانند به‌طور ناکشسان از طریق واکنش با الکترون‌های ظرفیت و درونی پراکنده شوند [۳، ۴]. برای مطالعه ویژگی‌های دی‌الکتریک نانو ساختارها با استفاده از REELS، برای اینکه مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون ( $\lambda$ ) کمتر از بعد نانو ساختار (چند نانومتر) باشد، انرژی اولیه الکترون باید پایین باشد. به‌طور مثال، در آزمایشات REELS، برای انرژی‌های کمتر از ۵۰۰ الکترون‌ولت، مقدار  $\lambda$  کمتر از یک نانومتر است. ابتدایی‌ترین مدلی که ارائه شد، ساده‌ترین هندسه احتمالی را ارائه می‌دهد و برای محاسبه افت‌های انرژی توده‌ای به‌کار می‌رود. چون اغلب، افت‌های توده‌ای (Bulk loss) بیشتر است لذا مدل محیط بی‌نهایت در اکثر حالات تقریب نسبتاً خوبی است. شکل ساده سطح مقطع نهایی به‌کار برده شده، از مزایای دیگر این مدل به‌شمار می‌رود. توسعه این مدل توصیف خوبی از پراکندگی ناکشسان الکترون در REELS را ارائه می‌دهند که قبلاً توسط توگارد<sup>۲</sup> و کرار<sup>۳</sup> [۵] مطالعه شده است. نتیجه مهم این مطالعه این بود که تقریب محیط بی‌نهایت، برای انرژی‌های بالا ( $\geq 5000\text{eV}$ ) معتبر است و در انرژی در حدود ۱۰۰۰ الکترون‌ولت انحرافات وجود دارد. پس از آنها، اثر سطح بر افت انرژی الکترون در حال حرکت در ورقه نازک توسط ریچی<sup>۴</sup> [۶] مطالعه شد.

پراکندگی ناکشسان الکترون‌هایی که در جامدات حرکت می‌کنند، مبتنی بر عبور الکترون از لایه جامد خیلی نازک بودند [۱]. در چند سال اخیر روش تجربی جدیدی به نام طیف‌سنجی افت انرژی الکترون بازتابی (REELS) برای تعیین سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون پیشنهاد شده است که در این روش جدید، سطح مقطع پراکندگی ناکشسان، از توزیع انرژی پرتو تک انرژی الکترون‌هایی که از سطح جامد بازتاب می‌شوند [۲] به‌دست می‌آید. این آزمایش خیلی ساده است و می‌تواند تقریباً برای هر جامدی به‌کار برده شود. سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون اطلاعاتی را درباره ساختار الکترونیکی سطح جامد در اختیار می‌گذارد، که همچنین یک کمیت مهم در روش QUASES<sup>۱</sup> برای آنالیز غیر مخرب سه بعدی نانو ساختار سطحی توسط XPS و AES می‌باشد. در روش REELS، الکترون‌ها مسافتی را در داخل جامد طی می‌کنند که تعدادی به‌خلاء در جهت تجزیه‌گر انرژی بر می‌گردند. الکترون‌های REELS اولیه ممکن است در طول جابه‌جایی در جامد رویدادهای پراکندگی را تجربه کنند که بسته به خواص اپتیکی و دی‌الکتریک مواد، این رویدادها با هم متفاوت هستند. واکنش با الکترون‌های ناحیه سطح جامد و توزیع انرژی الکترون‌های پس‌پراکنده شده، اطلاعاتی درباره ساختار الکترونیکی و باندهای شیمیایی بیرونی‌ترین نانولایه در اختیار می‌گذارد. طیف REELS شامل دو ناحیه است: اولی پیک کشسان، که به‌علت پراکندگی کشسان الکترون‌ها ایجاد می‌شود (الکترون‌ها انرژی خود را در دست نمی‌دهند) و دومی در انرژی‌های جنبشی پایین، برای الکترون‌هایی است که مقداری از انرژی خود را در اثر تحریک‌پذیری سطح جامد از دست می‌دهند. با تغییر انرژی اولیه الکترون‌ها، عمق در حال بررسی تغییر

<sup>3</sup> Kraaer<sup>4</sup> Ritchie<sup>1</sup> Quantitative Analysis of Surface Electron Spectra-<sup>2</sup> Tougaard

## تئوری

### تعیین سطح مقطع پاشندگی ناکشسان الکترون

#### از طیف افت انرژی الکترون بازتابی

پرتویی از الکترون با انرژی  $E_0$  به سطح برخورد کرده و توزیع انرژی اندازه‌گیری می‌شود. فرض می‌شود که نمونه همگن است و همین‌طور فرض می‌شود که احتمال برای افت انرژی  $T$  به‌ازای طول مسیر واحد و به‌ازای افت انرژی واحد تابعی ثابت از  $T$  است و مستقل از عمق واقعی زیر سطح جامد است. همچنین فرض می‌شود که برای طول مسیرهای  $R \ll 3\lambda$  توزیع طول مسیر  $R$  به‌صورت تابع نمایی  $\exp(-R/L)$  است که طول واپاشی  $L$  می‌تواند مثبت یا منفی باشد. سطح مقطع ناکشسان الکترون تجربی از طیف تجربی REELS به‌صورت زیر تعیین می‌شود:

$$\lambda^* K_{\text{exp}}(E_0, E_0 - E) = \frac{j_i(E) - \int_E^{E_0} \lambda^* K_{\text{exp}}(E_0, E' - E) j_i(E') dE'}{\int_{E_0}^{E_0} j_i(E') dE'} \quad 1$$

$j_L(E)$  توزیع انرژی اندازه‌گیری شده از الکترون‌های REELS و انتگرال در مخرج، مساحت قله کشسان است.

$$\lambda^* = \lambda L / (\lambda + L) \quad 2$$

$\lambda$  مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون است.

### تعیین تابع افت انرژی و سطح مقطع پاشندگی

#### ناکشسان نظری از مدل پاسخ تابع دی

#### الکتریک

اگر تابع افت انرژی (ELF) شناخته شده باشد سطح مقطع پاشندگی ناکشسان نظری  $K_{\text{th}}$  برای همه الکترون‌های REELS بر مبنای آزمایشات REELS قابل محاسبه است. که در اینجا  $E_0$  انرژی اولیه

تیتانیت استرانسیم ( $\text{SrTiO}_3$ ) به‌طور وسیعی در تکنولوژی به‌کار می‌رود که برای مثال می‌توان کاربردهای آن به‌عنوان بستر یا زیر لایه برای رشد لایه‌های نازک و همچنین به‌عنوان بلور مناسب گیت دی الکتریک در وسایل با پایه سیلیکون را برشمرد [۷]. این ساختار همچنین به‌عنوان مواد دی الکتریک در خازن‌ها، رساناهای یونی اکسیژنی در حسگرها و مواد پیزوالکتریک در محرک‌ها استفاده می‌شود [۸]، که ضرورت مطالعه این ماده را نمایان می‌کند. در اینجا، این مطالعه با تکنیک طیف سنجی افت انرژی الکترون بازتابی انجام شد. قبلاً، ویژگی‌های دی الکتریک این بلور با استفاده از طیف سنجی افت انرژی الکترون عبوری (TEELS) اندازه‌گیری شده است. Fabien و همکاران [۹] با استفاده از روش Tougaard-Chorkendorff سطح مقطع پاشندگی ناکشسان منفرد تجربی  $\text{SrTiO}_3$  را با اصلاح اثر پاشندگی چندگانه در طیف تجربی REELS به‌دست آوردند. آنها با استفاده از مدلی نظری سطح مقطع پاشندگی منفرد را به‌صورت ترکیب خطی از تابع افت انرژی توده  $(-\frac{1}{\epsilon})$  و تابع افت انرژی سطح  $(-\frac{1}{1+\epsilon})$  در نظر گرفتند. این تابع از بسط نوسانگرهای Drude-Loranz به‌دست می‌آید. در این مقاله، سطح مقطع نظری با استفاده از روش ارائه شده توسط Tougaard-Yubero (YT) [۱۰] به‌دست می‌آید، سپس با مقایسه آن با سطح مقطع تجربی تعیین شده به‌روش Tougaard-Chorkendorff، تابع دی الکتریک محاسبه می‌شود و در نهایت پارامتر تحریک پذیری سطح با استفاده از روش Pauly-Tougaard به‌دست می‌آید [۱۱].

به عمود به سطح است، که توسط Yubero-Tougaard [۱۲] محاسبه شده است.

$$K_{th} = \frac{\int_0^{\infty} dx Q(E_0, x, \theta_i, \theta_o) K_{eff}(E_0, \Delta E, x_0, \theta_i, \theta_o)}{\int dx Q(E_0, x, \theta_i, \theta_o)} \quad 5$$

که Q تابع توزیع طول مسیر برای آن الکترون‌هایی که تحت یک برخورد ناکشسان است.

### پارامتر تحریک پذیری سطح (SEP)

چندین تعریف برای SEP وجود دارد که ما در اینجا از تعریف ارائه شده توسط Pauly و Tougaard استفاده می‌کنیم. تحریک پذیری سطح توسط عبور الکترون از خلأ به جامد و بالعکس ایجاد می‌شود و در حالت کلی تحریک پذیری، به‌عنوان احتمال تحریک پذیری سطح SEP یا  $P_s(E, \theta)$  بیان می‌شود و میانگین تحریک پذیری الکترون با انرژی E وقتی که یک بار از سطح در زاویه  $\theta$  نسبت به عمود بر سطح عبور می‌کند، است. در اینجا ما SEP را از سطوح مقطع دیفرانسیلی پاشندگی ناکشسان محاسبه شده برای REELS با نرم‌افزار QUEELS و  $-\varepsilon(k, \omega)$  QUEELS-REELS محاسبه می‌کنیم. از رابطه زیر مسافت آزاد میانگین ناکشسان به‌دست می‌آید:

$$\lambda_{sc} = \left[ \int_0^{\infty} K_{sc}(E, \hbar\omega, \theta_i, \theta_o) d\hbar\omega \right]^{-1} \quad 6$$

که سطح مقطع پاشندگی ناکشسان با استفاده از نرم افزار QUEELS-REELS  $-\varepsilon(k, \omega)$  و با استفاده از بسط تابع دی‌الکترونیک در مدل Drude-Lindhard در معادله ۳ به‌دست می‌آید. اثر سطح به‌صورت زیر تعریف می‌شود

$$k_s = \int (K_{sc} - K_{inf}) d\hbar\omega \quad 7$$

به‌طوری‌که  $K_{inf}$  سطح مقطع پاشندگی ناکشسان توده است. SEP برای الکترون دو بار عبور کرده از سطح به‌صورت زیر است

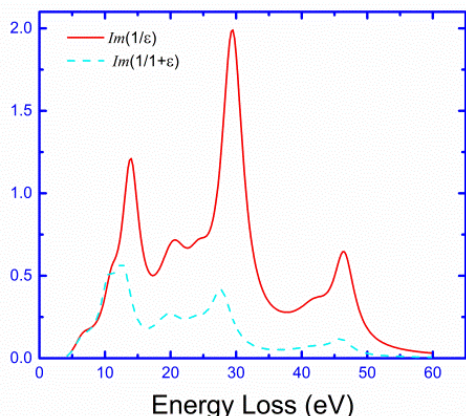
الکترون و  $\Delta E$  افت انرژی توسط یک الکترون در پاشندگی ناکشسان است. تابع افت انرژی برحسب نوسانگرهای نوع Drude-Lindhard بسط داده می‌شود.

$$\text{Im} \left\{ -\frac{1}{\varepsilon(k, \Delta E)} \right\} = \quad 3$$

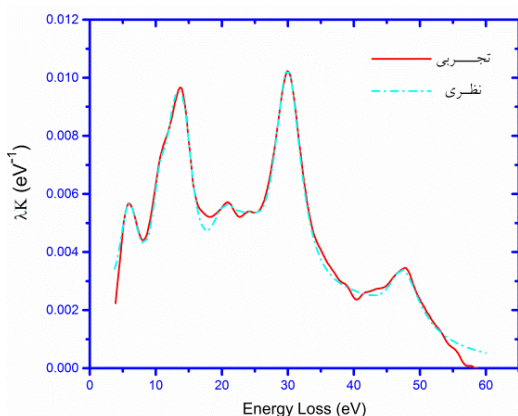
$$\sum_{i=1}^n \frac{A_i \gamma_i \Delta E}{((\hbar\omega_{0ik})^2 - \Delta E^2)^2 + \gamma_i^2 \Delta E^2} \times \theta(\Delta E - E_g)$$

$$\hbar\omega_{0ik} = \hbar\omega_{0i} + \alpha_i \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad 4$$

که پارامترهای  $A_i, \gamma_i, \hbar\omega_{0ik}$  و  $\alpha_i$  به‌ترتیب قدرت نوسانگر، ضرایب میرایی، انرژی برانگیختگی، ضریب پاشندگی تکانه نوسانگر  $i$  ام است.  $\hbar k$  تکانه انتقال یافته از الکترون‌های REELS به جامد است.  $\theta(\Delta E - E_g)$  تابع پله‌ای،  $E_g$  گاف نوار در نیم‌رساناها و عایق‌ها است که برای  $\Delta E \langle E_g$ ،  $\theta(\Delta E - E_g) = 0$  و برای  $\Delta E \rangle E_g$ ،  $\theta(\Delta E - E_g) = 1$  می‌باشد. وابستگی  $\omega_{0ik}$  به  $k$  به‌طور کلی شناخته شده نیست. اما ما از معادله ۴ با پارامتر تعدیل  $\alpha_i$  استفاده می‌کنیم. مقادیر ضرایب پاشندگی تکانه  $\alpha_i$  به جرم مؤثر الکترون وابسته است. به‌همین خاطر برای الکترون آزاد  $\alpha_i = 1$  و برای باندهای با انرژی پهن  $\alpha_i = 0$  است. روش کار چنین است که ابتدا با استفاده از سطح مقطع ناکشسان تجربی تعیین‌شده، پارامترهای معادله ۳ را به‌دست آورده و به‌عنوان تابع آزمایشی در محاسبه  $K_{th}$  استفاده می‌شود. سطح مقطع پاشندگی ناکشسان مؤثر  $K_{eff}$  برای الکترون منفرد REELS بر اساس تابعی با انرژی اولیه  $E_0$ ، تابع دی‌الکترونیک سیستم  $\varepsilon(k, \omega)$ ،  $x_0$  بیشینه عمقی که الکترون قبل از پاشندگی کشسان طی می‌کند،  $\theta_i$  زاویه ورودی و  $\theta_o$  زاویه خروجی الکترون نسبت



شکل ۱. تابع افت انرژی با استفاده از پارامترهای تعیین شده.



شکل ۲. سطح مقطع تجربی و نظری.

شکل ۲ سطح مقطع تجربی و نظری به‌نجا شده را نمایش می‌دهد. ملاحظه می‌شود که توافق خوبی بین این دو وجود دارد. توزیع زاویه‌ای SEP را با استفاده از معادله ۱۰ برای بلور مورد نظر محاسبه کرده‌ایم. نتایج برحسب تابعی از  $\theta$  برای انرژی‌های ۱۰۰۰، ۱۴۲۳، ۲۰۰۰، ۲۵۰۰ و ۳۰۰۰ الکترون ولت در شکل ۳ به نمایش در آمده‌اند.

در کاربرد تجربی توزیع‌های SEP با معادلات ساده وابسته به زاویه  $\theta$  و انرژی E و پارامترهای وابسته به ماده برآزش می‌شوند. در محاسبات انجام شده، SEP را با نتایج حاصل از محاسبات Oswald تعدیل شده توسط Werner با یک پارامتر وابسته به ماده a برآزش کرده‌ایم.

$$P_s(E, \theta) = \frac{1}{0.173a\sqrt{E} \cos\theta + 1} \quad 11$$

$$P_s(E, \theta_i) + P_s(E, \theta_0) = \lambda_{sc} K_s \quad 8$$

در محاسبات همیشه زاویه ورودی ثابت فرض می‌شود و SEP برحسب زوایای خروجی به دست می‌آید. برای مثال برای  $\theta_i = 45^\circ$

$$P_s(E, 45) = \frac{1}{2} \lambda_{sc}(E, 45, 45) K_s(E, 45, 45) \quad 9$$

که SEP عبوری از سطح منفرد به صورت زیر به دست می‌آید.

$$p_s(E, \theta) = \lambda_{sc}(E, 45, \theta) K_s(E, 45, \theta) - P_s(E, 45) \quad 10$$

## نتایج و بحث

در محاسبات با کمک نرم‌افزار QUASES-XS از طیف تجربی REELS  $\lambda^* K_{exp}$  و استفاده از نرم‌افزار REELS- $\varepsilon(k, \omega)$ -REELS تابع افت انرژی (ELF) مواد و همچنین سطح مقطع نظری  $K_{th}$  را به دست آوردیم. با توجه به شکل سطح مقطع تجربی به دست آمده از طیف REELS، یک تابع افت انرژی آزمون برای  $\text{SrTiO}_3$  در نظر می‌گیریم. سپس تابع افت انرژی را اصلاح می‌کنیم تا بین سطح مقطع نظری و تجربی هماهنگی ایجاد شود. مقادیر عددی ELF تیتانیت استرانسیم در جدول ۱ و نمودار حاصل از آنها در شکل ۱ ارائه شده‌اند.

جدول ۱. پارامترهای تعیین شده تابع افت انرژی.

i	$\hbar\omega_{0i} (ev)$	$A_i (ev^2)$	$\gamma_i (ev)$	$\alpha$
۱	۶٫۶	۱٫۲۵	۳٫۷	۰٫۰۵
۲	۱۱	۱٫۵۳	۲٫۷	۰٫۸۸
۳	۱۴٫۲	۱۴٫۵	۳٫۳	۰٫۶۳
۴	۲۰٫۷	۱۴٫۲	۵٫۷	۰٫۲۸
۵	۱۴٫۳	۱۰	۵٫۴	۰٫۳۳
۶	۳۰	۴۲	۴٫۶	۰٫۰۱۵
۷	۳۹	۱۲	۱۲	۰٫۰۰۶
۸	۴۲٫۲	۱۱٫۵	۱۱	۰٫۰۰۱
۹	۴۷٫۳	۳۵	۵٫۲	۰٫۰۵۴

و توگارد [۱۱] با در نظر گرفتن اثر انرژی گاف در محاسبه  $a$  به معادله زیر رسیده‌اند.

$$a_{PT} = 0.039\hbar\Omega_p + 0.4 + 0.22E_G \quad ۱۳$$

$E_G$  انرژی گاف است و  $a_{PT}$  در حدود ۱٫۹۹ به دست آمد. مقادیر عددی به دست آمده در جدول ۲ ارائه شده است که  $a_{PT}$  به دست آمده به نتایج حاصل از محاسبات ما نزدیک است. اختلاف اندک  $a$  به دست آمده توسط ما با مقدار  $a_{PT}$  را می‌توان به نقص در بلور و تأثیر آن در نتایج تجربی نسبت داد.

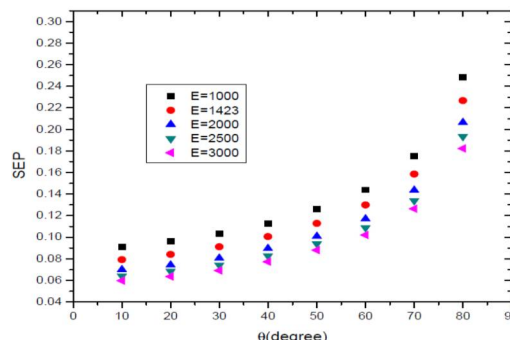
جدول ۲. مقادیر عددی به دست آمده از محاسبات ما و مقادیر برازش شده با معادلات ۱۲ و ۱۳.

	$a$ این کار	$a_w$	$a_{PT}$
SrTiO <sub>3</sub>	۱٫۸۸	۱٫۲	۱٫۹۹

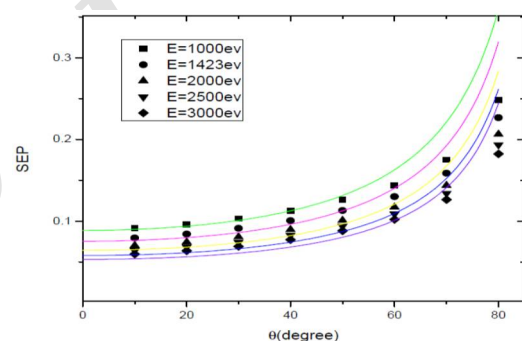
### نتیجه گیری

در این مقاله خواص دی الکتریک تیتانیت استرانسیم با استفاده از مدل YT به دست آمد و مشاهده شد که بین سطح مقطع تجربی و نظری هماهنگی خوبی وجود دارد. از این مدل می‌توان برای تعیین خواص دی الکتریک نانولایه‌ها و نانو ساختارها استفاده کرد. همچنین پارامتر تحریک پذیری سطح (SEP) برای این بلور در انرژی‌های متفاوت به روش پاؤلی و توگارد [۱۱] محاسبه و ملاحظه شد که با افزایش انرژی این پارامتر کاهش می‌یابد. در پایان SEP با معادله Werner برازش شد و با مقایسه مقدار  $a$  به دست آمده با مقدار  $a_w$  و  $a_{PT}$  مشاهده شد که بین  $a_{PT}$  و  $a_w$  هماهنگی خوبی وجود دارد. اصلاح اثر SEP در طیف‌سنجی الکترونی می‌تواند دقت این طیف‌سنجی‌ها را بالاتر ببرد. بنابراین نتایج این مقاله جهت ایجاد یک بانک داده برای مواد مختلف می‌تواند از اهمیت بالایی برخوردار باشد.

در رابطه فوق  $E$  بر حسب الکترون ولت (eV) و ضریب  $۰٫۱۷۳$  بر حسب  $eV^{-1/2}$  و  $a$  بدون دیمانسیون است. نتایج حاصل در شکل ۴ نمایش داده شده است. ملاحظه می‌شود که بین محاسبات و برازش با معادله ۱۲ هماهنگی وجود دارد.



شکل ۳. توزیع زاویه‌ای SEP.



شکل ۴. توزیع زاویه‌ای SEP محاسبه شده از مدل Tougaard و Pauly برازش‌های انجام شده با معادلات ۱۳ و ۱۴.

مقدار عددی به دست آمده ۱٫۸۸ است که در ادامه محاسبات به مقایسه این پارامتر با مقدار به دست آمده از فرمول Werner که  $a_w$  نامیده می‌شود، پرداخته شده است.

$$a_w = 0.039\hbar\Omega_p + 0.4 \quad ۱۲$$

که در آن  $\hbar\Omega_p$  انرژی پلاسمون است، که طریقه به دست آوردن انرژی پلاسمون در مرجع [۱۳] آمده است.  $a_w$  در حدود ۱٫۲ است. از آنجایی که در معادله Werner اثر انرژی گاف در نظر گرفته نشده است، مشاهده می‌شود که نتایج به دست آمده از محاسبات ما متفاوت از مقدار محاسبه شده از معادله ۱۲ است. پاؤلی

[9] F. Paumier, V. Fouquet, M.J. Guittet, M. Gautier-Soyer, R.H. French, G. Tan, Y.M. Chiang, M. Tang, A. Ramos, S.Y. Chung, Reflection electron energy loss spectroscopy of nanometric oxide layers and of their interfaces with a substrate, *Materials Science and Engineering A* **422** (2006) 29–40.

[10] F. Yubero, J.M. Sanz, B. Ramskov, S. Tougaard, Model for quantitative analysis of reflection-electron-energy-loss spectra: Angular dependence, *Physical Review B* **53** (1996) 9719-9727.

[11] N. Pully, S. Tougaard, Theoretical determination of the surface excitation parameter for Ti, Fe, Cu, Pd, Ag, and Au, *Surface Science* **601** (2007) 5611-5615.

[12] F. Yubero, S. Tougaard, Quantitative Analysis of Reflection Electron Energy-loss Spectra, *Surface and Interface Analysis* **19**, (1992) 269-273.

[13] B. Lesiak, A. Kosinski, Influence of Recoil Effect and Surface Excitations on the Inelastic Mean Free Paths of Electrons in Polymers, *Acta Physics A* **109** (2006) 789-800.

## سپاس‌گزاری

از سون توگارد (از دانشگاه SDU دانمارک) به‌خاطر در اختیار قرار دادن نرم‌افزار مورد استفاده کمال تشکر به‌عمل می‌آید.

## مرجع‌ها

[1] S. Tougaard, F. Yubero, Ver 1.2, QUASES, 1998-2004, Software for Quantitative REELS and Determination of Inelastic Electron scattering Cross Sections.

[2] G.L. Tan, L.K. Denoyer, R.H. French, A. Ramos, M. Gautier-Soyer, Y.M. Chiang, *Materials Research Society Symposium Proceedings* **178** (2004).

[3] R.F. Egerton, *Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscopy*. 2<sup>nd</sup> ed. New York: Plenum, (1996).

[4] S. Hajati, *Quantitative Electron Spectroscopy of Nanostructures; REELS, dielectric properties, XPS, composition and nano-imaging*, (2009) Thesis.

[5] S. Tougaard, J. Kraer, Inelastic-electron-scattering cross sections for Si, Cu, Ag, Au, Ti, Fe, and Pd, *Physical Review B* **43** (1991) 1651-1661.

[6] R.H. Ritchie, Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films, *Physical Review* **106** (1957) 874-881.

[7] C.H. Lanier, A. Van de walle, Atomic-scale structure of the SrTiO<sub>3</sub>(001)-c(6×2) reconstruction: Experiments and first-principles calculations, *Physical Review B* **76** (2007) 045421.

[8] K. Van Benthemand, C. Elasser, Bulk electronic structure of SrTiO<sub>3</sub>: Experiment and theory, *Journal of Applied Physics* **90** (2001) 6156-6164.

# Characterization of nanofilms by reflection electron energy loss spectroscopy: A study of SrTiO<sub>3</sub>

Jamileh Deris<sup>1</sup>, Shaaker Hajati<sup>\*,1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Yasouj University, Yasouj, Iran

<sup>2</sup>Department of Semiconductors, Materials and Energy Research Center (MERC), Karaj, Iran

Received: 29.02.2016    Final revised: 01.04.2017    Accepted: 01.05.2017

## Abstract

The electronic properties of thin films and nanostructures as well as the surface electronic structure can be obtained using reflection electron energy loss technique at low energy. In this study, dielectric function of SrTiO<sub>3</sub> is obtained by Yubero-Tougaard method using the experimental inelastic cross section obtained by Tougaard-Chorkrndorf method. Theoretical cross section obtained at energy 1423 eV, incidence angle 15° and exit angle 35° was found to be in good consistency with experimental cross section. In addition, the angular distribution of the surface excitation parameter for this crystal was determined at energies 1000, 1423, 2000, 2500 and 3000 eV. To this end, the definition presented by Pauly and Tougaard was used which relies on the variation in excitation probability at surface and moving in semi-infinite medium. This parameter was calculated based on the differential inelastic electron dispersion cross section using QUEELS software, which is valid for reflection electron energy loss spectrum.

**Keywords:** Reflection electron energy loss spectroscopy, SrTiO<sub>3</sub>, Dielectric function, Surface excitation parameters

---

\*Corresponding Author: Hajati@mail.yu.ac.ir