

Diss. ETH Nr. 8994

**Experimental and Theoretical Study of
Scattering State Fine Structures Observed in
Secondary Electron Spectroscopy from
Solid Surfaces**

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by

PHILIPPE AEBI
Dipl. Phys. ETH
born June 29, 1960
citizen of Murten (Fribourg)

accepted on recommendation of
Prof. Dr. G. Kostorz, examiner
Prof. Dr. W. Baltensperger, co-examiner
PD Dr. M. Erbudak, co-examiner

 24.11.89
Prof. Dr. G. Kostorz

1989

Abstract

Characteristic electronic transitions and fine structures in their near and extended edge region are investigated with electron energy loss spectroscopy for silicon and copper. Similarly, fine structures of the secondary electrons and of those located on the high kinetic energy side of core-valence-valence Auger transitions are examined.

These fine structures contain information about the local geometry around the excited atom through the excitation of a core electron into a scattering state above the Fermi level. Depending on their kinetic energy, the scattering paths interfere constructively or destructively such that they represent the angular momentum projected empty density of states selected by the matrix elements. The single-particle scattering picture allows neighbor distances and bond angles to be extracted, yet electronic processes can often complicate this simple approach.

In order to test the applicability of this model, full multiple scattering calculations are presented and compared with measurements; an expression is derived and implemented in order to include excitations described by the first Born approximation. By virtue of the calculation of the generalized oscillator strength mechanisms are shown to explain the different behavior of the core edges of Cu in relation to the momentum transfer during excitation.

Analogous to the structures observed in electron energy loss spectroscopy, spectra of secondary electrons from Cu exhibit modulations up to a kinetic energy of 300 eV. They are well reproduced by multiple scattering calculations of the unoccupied density of states performed for different angular momentum components. This shows that the density of states dictates the observed structure.

Zusammenfassung

Charakteristische elektronische Übergänge und Feinstrukturen in den kantennahen und -fernen Regionen werden mit Elektronenenergieverlustspektroskopie untersucht. Ähnliche Strukturen sind bei den Sekundärelektronen und denjenigen auf der Hochenergieseite von Rumpf-Valenz-Valenz-Augerübergängen zu beobachten.

Durch Anregen eines Rumpfelektrons in Streuzustände oberhalb des Fermi-Niveaus enthalten diese Feinstrukturen Informationen über die lokale Geometrie um ein angeregtes Atom herum. Je nach kinetischer Energie der Elektronen in den Streuzuständen interferieren sie konstruktiv oder destruktiv, so dass sie die durch Matrixelemente ausgewählte drehimpulsprojizierte leere Zustandsdichte darstellen. Einem Einteilchenbild folgend, können Abstände nächster Nachbarn und Bindungswinkel extrahiert werden, doch komplizieren elektronische Prozesse oft dieses einfache Bild.

Um die Anwendbarkeit dieses Modells zu untersuchen, wurden Vielfachstreurechnungen durchgeführt und mit den Messungen verglichen: Um die Anregung zu berücksichtigen, wurde ein Ausdruck in erster Bornscher Näherung hergeleitet und implementiert. Das Berechnen der verallgemeinerten Oszillatorstärke erlaubt Einsicht in das verschiedenartige Verhalten der Rumpfanregungen von Cu bezüglich des Impulsübertrages.

Analog zu den in Elektronenenergieverlustspektren beobachteten Strukturen zeigen die Sekundärelektronenspektren von Cu Modulationen bis zu einer kinetischen Energie von 300 eV. Sie werden durch die Vielfachstreurechnungen der leeren Zustandsdichte für verschiedene Drehimpulse wiedergegeben. Dies zeigt, dass die Zustandsdichte die beobachteten Strukturen bestimmt.