

III 族氮化半導體的表面激發參數

Surface excitation parameter for III nitride semiconductors

計劃編號：NSC 96-2221-E-009-214

執行期間：96/08/01-97/07/31

主持人：桂正楣 交通大學電子工程學系教授

一、中文摘要（關鍵詞：電子；表面激發參數；介電函式；III 族氮化物半導體）

本計劃建立了電子穿越固體表面之表面激發參數的理論模式，並推導出表面激發參數與穿越角及電子能量之關係式。當電子穿越固體表面時，會產生表面電漿激發效應，此一激發效應通常用表面激發參數來詮釋。III 族氮化物半導體對各種光電領域的應用有著重要的發展。利用延伸式德魯特介電模型，計算帶有 200 至 1000 eV 的能量之電子以各種不同穿越角度穿越 III 族氮化物半導體固體時，所造成的表面激發參數。結果顯示，表面激發參數隨著穿越角的增加而變大；隨著電子能量的增加而變小。

英文摘要（關鍵詞：electron, surface excitation parameter, dielectric function, III-nitride semiconductors）

Theoretical derivations of the surface excitation parameter (SEP) for electrons crossing solid surfaces were made for different crossing angles and electron energies. When electrons cross a solid surface, surface plasmon excitations may be generated. These excitations induced by electrons moving in the vacuum are generally characterized by the surface excitation parameter (SEP). III-nitride semiconductors are of considerable importance for applications in light-electronic field. SEP was calculated for 200-1000 eV electrons crossing the III-nitride semiconductor solid surfaces with various crossing angles using the extended Drude dielectric function. Calculated results

showed that the SEP decreased with electron energy but increased with crossing angle.

二、計劃緣由與目的

當快速電子入射到固體材質時，電子和固體之間的非彈性交互作用之定量分析在表面靈敏性散射能譜的研究中扮演著重要的角色。過去的一些研究 [1-3] 顯示，其中表面激發效應是影響電子能譜的重大因素，因此需要一個模型來精確地計算表面激發效應對電子能譜的影響。

過去我們根據介電理論所建立的理論模式，提出表面激發參數來描述在真空中之表面激發效應 [2,4,5]。然而在過去所使用關於表面激發參數的理論或方法中，往往都只有考慮電子以垂直方向進出固體，而沒有考慮以斜角入射或入射的情形。所以在本計畫中，我們將利用新近推出之理論模式，計算當電子以不同角度進出 III 族氮化物半導體時，所產生的表面激發參數。

三、研究方法及成果

本計劃採用的是延伸式德魯特介電函式，並利用 III 族氮化物半導體的光學實驗數據及電子能量損失能譜資料來決定介電函式的參數。接著從電磁介電理論出發，在遵守邊界條件的情形之下，去解柏松方程式，而得到表面感應電荷，進而求得在真空之中的感生電位，再利用這感生電位去求出感生電場，之後配合阻擋本領和感生電場之間的關係式，從而可以得到電子所受到的阻擋本領，然後再利用阻擋本領和微分倒數非彈性平均自由行徑的關係式，即

可得到微分倒數非彈性平均自由行徑，進一步就可以再得出倒數非彈性平均自由行徑，最後將電子於真空部分的倒數非彈性平均自由行徑積分起來就是表面激發參數。

圖(一)以氮化銦為例，實線是本計畫所採用的延伸式德魯特介電函式，點線為由光學實驗數據資料 [6,7] 所得之實驗數據。無論是介電函式的實數 (ϵ_1)、虛數 (ϵ_2) 部分，還有體 ($\text{Im}[-1/\epsilon]$)、表面 ($\text{Im}[-1/(\epsilon+1)]$) 損失函式，都與實驗數據相當吻合。

圖(二)是針對帶有 800 eV 能量的電子，以不同出射角，從氮化鋁進入真空時，所產生的表面激發參數。結果顯示，隨著角度(α)的變大，表面激發參數也越大，這是因為與表面交互作用的時間長，表面激發效應就比較多。從圖上也可以發現，過去用 $(\cos\alpha)^{-1}$ 作為角度關係之假設的研究 [5] 只能得到近似的結果。除此之外，表面激發參數(P_s)與電子能量(E)及角度的

關係，可以被回歸成 $P_s = \frac{aE^{-b}}{(\cos\alpha)^c}$ ，其中 a 、

b 、 c 都是與材料有關的係數，對於不同的 III 族氮化物半導體，其係數記錄在表(一)。在圖上可以發現此一回歸曲線與計算結果相當吻合。

圖(三)則是針對不同出射角，帶有不同能量的電子，從氮化銦進入真空時，所產生的表面激發參數。結果顯示，隨著電子能量的變大，表面激發參數會變小，這是因為電子速度變快，與固體表面的交互作用時間反而變少，表面激發效應就比較少。同樣地本研究的回歸曲線與計算結果相當吻合。

圖(四)則和圖(二)是類似的圖，只是改成表示帶有 600 eV 能量的電子從真空進入氮化鎵的結果。此圖顯示相同的結論：隨著入射角的增加，表面激發參數會變大。

圖(五)則是針對以 60° 穿越角，帶有不同能量的電子，在氮化鋁及真空之間移動時，所產生的表面激發參數。此圖顯示相同的結論：隨著電子能量的增加，表面激發參數則會變小。此外，由圖(五)還可以發現，對於從真空入射固體的電子，其表面激發參數比從固體出射真空的電子之表面激發參數小，這是由於入射電子在真空部分受表面電荷吸引而加速，反之出射電子在真空部分受表面電荷排斥而減速，因

此導致入射電子在靠近表面的時間比出射電子短而有比較小的表面激發效應。

四、結果與討論

III 族氮化物半導體在各種光學領域的應用上具有極大的重要性。本計畫根據電磁介電理論，建構延伸式德魯特介電函式，研究不同電子穿越角及不同能量對 III 族氮化物半導體表面激發參數之影響。結果顯示隨著穿越角的增加或電子能量的減少，表面激發參數會增加。另外，入射電子的表面激發參數會比出射電子大。最後，所計算出的表面激發參數可以用一個簡單的式子來回歸，此一回歸式在表面能譜分析將會有很大的助益。

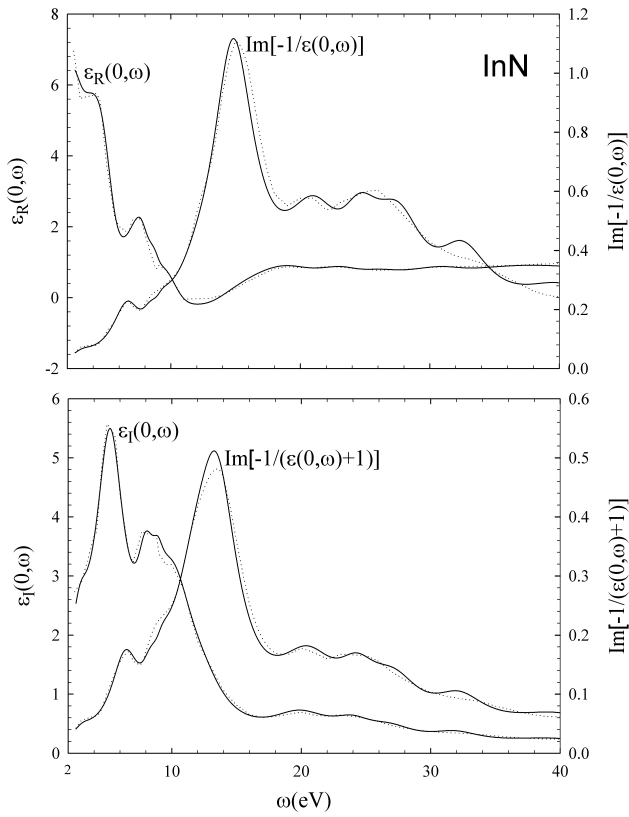
五、參考文獻

- [1] F. Yubero, S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 2486.
- [2] C.J. Tung, Y.F. Chen, C.M. Kwei, T.L. Chou, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 16684.
- [3] Y.F. Chen, P. Su, C.M. Kwei, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 17547.
- [4] Y.F. Chen, C.M. Kwei, *Surf. Sci.* **364** (1996) 131.
- [5] C.M. Kwei, C.Y. Wang, C.J. Tung, *Surf. Interface Anal.* **26** (1998) 682.
- [6] Q. Guo, O. Kato, M. Fujiaawa, A. Yoshida, *Solid State Commun.* **83** (1992) 721.
- [7] Q. Guo, H. Ogawa, A. Yoshida, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **79** (1996) 9.
- [8] R. Oswald, Ph.D. thesis, University of Tübingen, Tübingen, 1997.

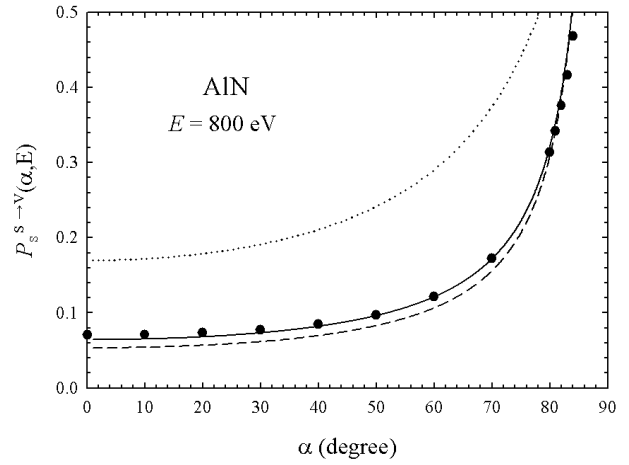
六、相關論文

1. Y. H. Tu, C. M. Kwei, C. J. Tung, *Surf. Sci.*, **601**, 865-870 (2007). (SCI)
2. C. M. Kwei, Y. H. Tu, C. J. Tung, *Vacuum*, **82**, 197-200 (2008). (SCI)

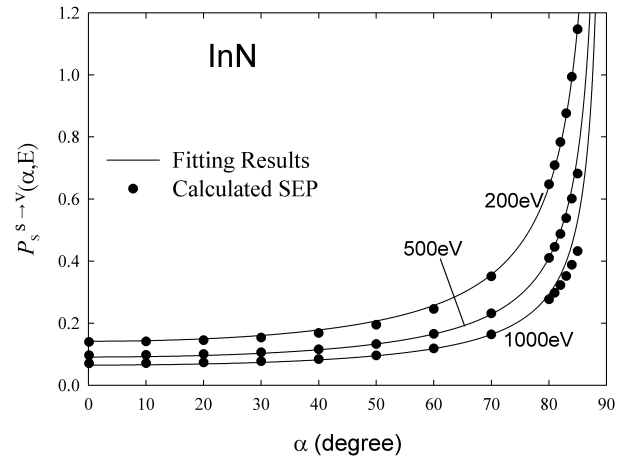
七、圖表



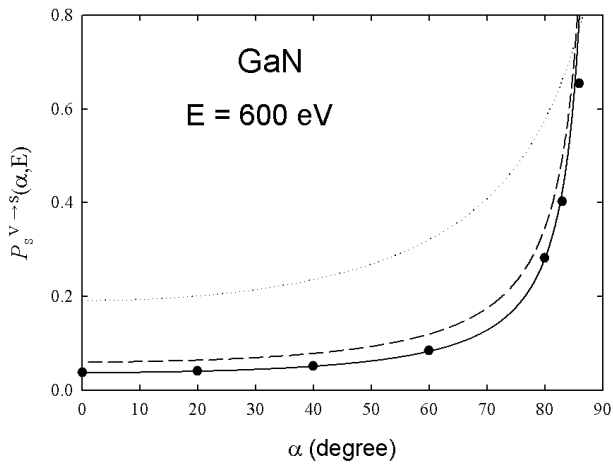
圖(一) 氮化銦的介電函式。實線為本計劃採用模式所計算出來的結果；點線為由光學實驗數據所得之實驗數據 [6,7]。



圖(二) 針對帶有 800 eV 能量的電子，以不同出射角，從氮化鋁進入真空時，所產生的表面激發參數。實點為本計劃採用模式所計算出來的結果；實線為利用表(一)的回歸線；虛線、點線分別為 Kwei [5]、Oswald [8] 的計算結果。



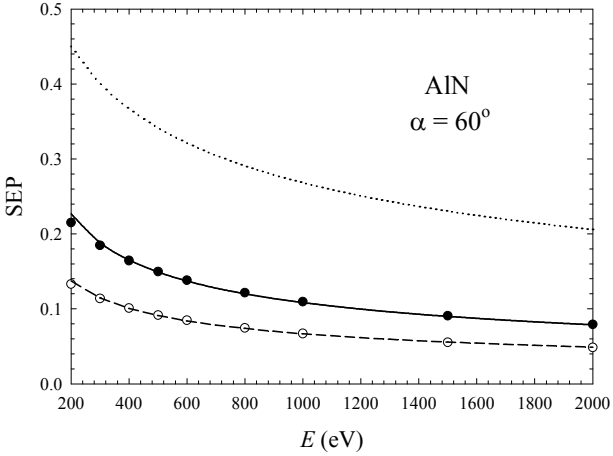
圖(三) 針對不同出射角，帶有不同能量的電子，從氮化銦進入真空時，所產生的表面激發參數。實點為本計劃採用模式所計算出來的結果；實線為利用表(一)的回歸線。



圖(四) 針對帶有 600 eV 能量的電子，以不同入射角，從真空進入氮化鎵時，所產生的表面激發參數。實點為本計劃採用模式所計算出來的結果；實線為利用表(一)的回歸線；虛線、點線分別為 Kwei [5]、Oswald [8]的計算結果。

表(一) 不同物質在方程式(1)中的回歸係數。

	$P_s^{S \rightarrow V}$			$P_s^{V \rightarrow S}$		
	a	b	c	a	b	c
AlN	1.2938	0.4491	0.92	0.6617	0.4480	1.16
GaN	1.3820	0.4596	0.91	0.6996	0.4584	1.15
InN	1.8351	0.4833	0.86	0.9362	0.4862	1.12



圖(五) 針對以 60° 穿越角，帶有不同能量的電子，在真空與氮化鋁之間移動時，所產生的表面激發參數。實點及空心點分別代表本計劃採用模式對於出射及入射電子所計算出來的結果；實線及虛線分別為利用表(一)所得對於出射及入射電子的回歸線；點線為 Oswald [8]的計算結果。