

自旋极化电子显微术及蒙特卡罗模拟^{*}

孙霞[†] 丁泽军 吴自勤

(中国科学技术大学天文与应用物理系 结构分析重点实验室 合肥 230026)

摘要 简述了与自旋相关的电子的弹性散射和非弹性散射过程,综述了极化电子束的表征、获得、探测及其在低能电子显微学中的应用,介绍了对自旋极化电子进行电子散射过程的蒙特卡罗模拟的一种简单模型.

关键词 自旋极化,散射,蒙特卡罗模拟

SPIN POLARIZATION ELECTRON MICROSCOPY AND MONTE-CARLO SIMULATION

SUN Xia[†] DING Ze-Jun WU Zi-Qin

(Structure Research Laboratory and Department of Astronomy and Applied Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract Spin correlated elastic and inelastic electron scattering processes are briefly described. The characterization, production and measurement of spin-polarized beams as well as their application in low energy electron microscopy are summarized. A simple Monte-Carlo model is introduced to calculate the spin-polarized electron scattering process.

Key words spin polarization, scattering, Monte-Carlo simulation

1 引言

随着薄膜生长技术和金属多层膜磁性器件应用技术的迅速发展^[1],自旋极化电子显微术及相应的蒙特卡罗模拟引起愈来愈广泛的关注.

最简单的自旋极化电子显微术是利用现有的扫描电子显微镜,配上能探测自旋取向不同的电子的Mott探测器.扫描电子显微镜中的入射电子束的自旋取向向上和向下的数是相同的,即非自旋极化的,但经过磁性材料散射后,背散射电子和二次电子都出现自旋极化,即不同散射方向上自旋取向不同的电子数显著不同.利用自旋取向衬度进行成像的方法称为自旋极化扫描电子显微术(SPSEM).进一步将自旋极化电子显微术和近期发展起来的低能电子显微术结合起来,形成自旋极化低能电子显微术(SPLEEM).在这种方法中,入射低能电子束可以是非自旋极化的,也可以是自旋极化的.非自旋极化的入射低能电子束经过磁性材料的散射后出现自旋极化.

实际上,入射电子在固体中的散射几率和自旋取向是有关的.例如,对自旋极化电子束来说,散射到相同的散射角但不同的方位角的电子数是不同的,这是量子力学的结果^[2].因此,对自旋极化电子

进行电子散射过程的蒙特卡罗模拟,需要考虑和自旋取向有关的弹性和非弹性散射.当然,对非自旋极化电子束来说,平均效应可以认为散射是自旋无关的,常规的电子散射的蒙特卡罗模拟就是这样进行的.

扫描隧道显微术中的隧道电流一般是非自旋极化的,但特殊制备的铁磁性针尖可以产生自旋极化隧道电流,利用它可以探测微观磁结构,有兴趣的读者可以参考文献[3].

2 自旋极化电子的弹性散射

电子在非铁磁性固体中的散射是一个随机过程,如果固体由几种原子组成,则电子被某一种原子散射的概率和该原子的百分比浓度成正比.电子在原子势场中的弹性散射可以用简单的屏蔽卢瑟福散射截面描述,但是更准确的公式是Mott散射截面.对自旋极化电子来说,Mott微分散射截面可以表示为

$$\alpha(\theta) = (|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2) (1 + S_u \cdot S) \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10025420),教育部博士点基金和中国科学技术大学青年基金资助项目

2002-03-05收到初稿,2002-05-08修回

[†] 通讯联系人, E-mail: sunx@ustc.edu.cn

这里的 $f(\theta)$ 和 $g(\theta)$ 是量子力学分波法得到的复散射振幅,两个振幅的平方之和就是散射截面,它表示散射到 θ 角处单位立体角的概率。 S_u 是散射后电子的自旋极化矢量, S 是散射前电子的自旋极化矢量, $S_u \cdot S = \pm 1$ 。如果入射电子束的自旋不同取向的数是等量的,对大量电子散射的平均后, $S_u \cdot S = 0$,得到的就是常规的 Mott 弹性散射截面。如果入射电子束的自旋是完全极化的,如图 1 是应用在 SPSEM 中的 Mott 极化探测器的原理示意图,图中电子束的自旋取向平行 y 轴,沿 z 轴入射,与靶碰撞后,由于入射电子是自旋极化的,被散射到两个方向($\theta, \phi = 0$)和($\theta, \phi = \pi$)的电子数由于(1)式中自旋极化部分的影响而有显著的不同,分别以 N_1 和 N_2 表示,两个方位角上散射电子数的非对称性可以用参数 $A(\theta)$ 表示^[4]:

$$A(\theta) = (N_2 - N_1) / (N_2 + N_1),$$

$A(\theta)$ 可作为 SPSEM 的衬度信号。

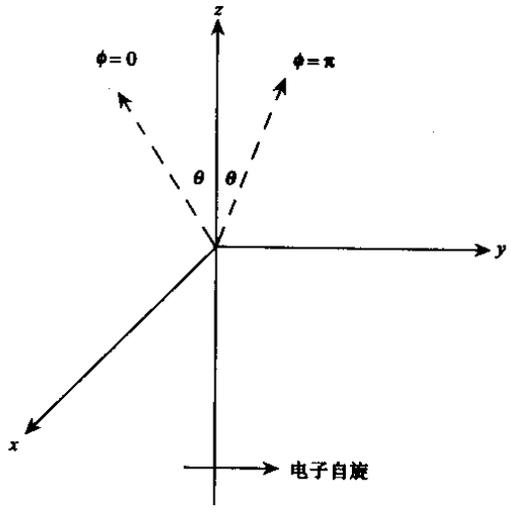


图 1 Mott 极化探测器原理示意图^[4]

图 2 是厚度分别为 20, 50, 150 和 300nm 的 Au 膜对 100keV 入射电子背散射 ($\theta = 90 \sim 180^\circ$) 的非对称参数 $A(\theta)$ 的实验曲线^[4],图中还给出了由(1)式在图 1 的简化条件下得到的自旋极化相关项的理论曲线 $S(\theta)$ (Sherman 函数),它的表达式是

$$S(\theta) = - [f^*(\theta)g(\theta) - g^*(\theta)f(\theta)] / (|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2), \quad (2)$$

式中的 * 号表示复数共轭。具体的 $\alpha(\theta)$ 和 $S(\theta)$ 计算可参考文献 [2]。由图可见, $A(\theta)$ 极大值约在 120° 附近,随着 Au 膜厚的减小, $A(\theta)$ 不断增大并接近单次散射的 $S(\theta)$ 函数。这是由于膜厚增加后,背散射

电子经过多次散射使自旋极化程度不断减小的缘故。膜厚使 $A(\theta)$ 减小是一种不利因素,但膜厚使背散射电子数(信号)增大又是有利的因素,模拟计算得出,对 100keV 的入射电子,最佳 Au 膜厚度约为 200nm。当入射电子能量从 100keV 降到 20keV 时, $A(\theta)$ 降为原来的 1/2 到 1/3 (Au 膜厚 < 80nm)。

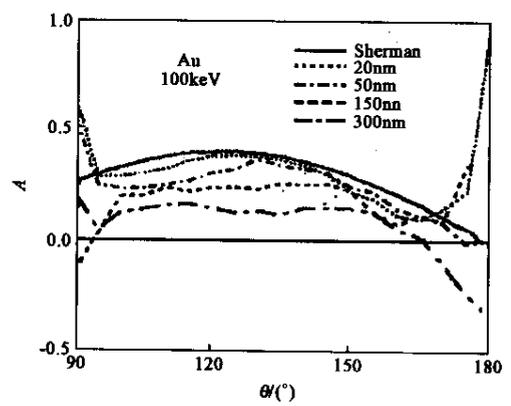


图 2 不同厚度的 Au 膜对 100keV 入射电子背散射的非对称参数 A 随散射角 θ 的变化^[4]

图 1 给出的简化探测条件也就是所谓的 Mott 极化探测器的实际探测条件。每经过一次散射,自旋极化的程度都会降低。利用蒙特卡罗模拟,不仅可以计算出电子的轨迹,还可以了解轨迹上的自旋取向的变化过程。

3 铁磁材料中二次电子的自旋极化

Fe, Co, Ni 原子的价电子组态分别是 $3d^64s^2$, $3d^74s^2$ 和 $3d^84s^2$, 它们形成固体后,局域在原子范围内的 3d 电子由于量子力学的交换作用,形成 3d 电子自旋向上和自旋向下的两个子能带。图 3 是 Ni 的两个 3d 子能带的态密度^[5],由图可见,自旋向上的子能带比自旋向下的子能带低,从费米能级 E_F 的位置可见,前者填满,后者在 E_F 以上还有较多空的能态。由于自旋向上的 3d 电子多于自旋向下的电子,3d 电子是自旋极化的。Ni 的极化率(两种电子数之差与两者之和的比值)约为 5.5%, Fe 的极化度则达到 27%。在二次电子主要通过价电子的激发形成时,自旋向上的二次电子将多于自旋向下者,即出现二次电子的自旋极化^[6]。

这样的能带结构将使能量不高(如 keV 量级)的入射电子或二次电子的非弹性散射随自身自旋取向而变,自旋向下的电子的非弹性散射的概率大,不易

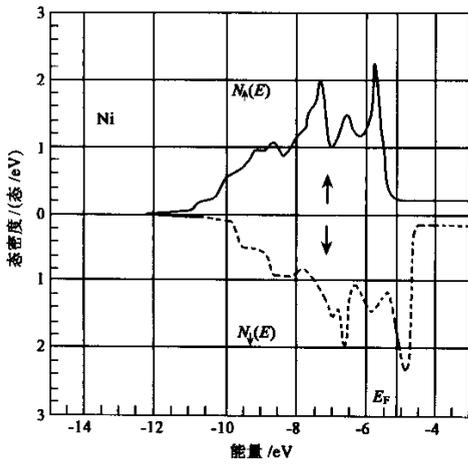


图3 Ni的自旋向上和自旋向下能带态密度^[5]

经过多次散射溢出样品成为二次电子信号,从而使自旋向上的二次电子多于向下者.图4说明了自旋反转非弹性散射^[5],图中已将3d能带结构大大简化,由图可见,自旋向下电子跌入空态,同时激发自旋向上的电子超过真空能级成为二次电子.相反的自旋反转过程也可以发生,但概率较小.

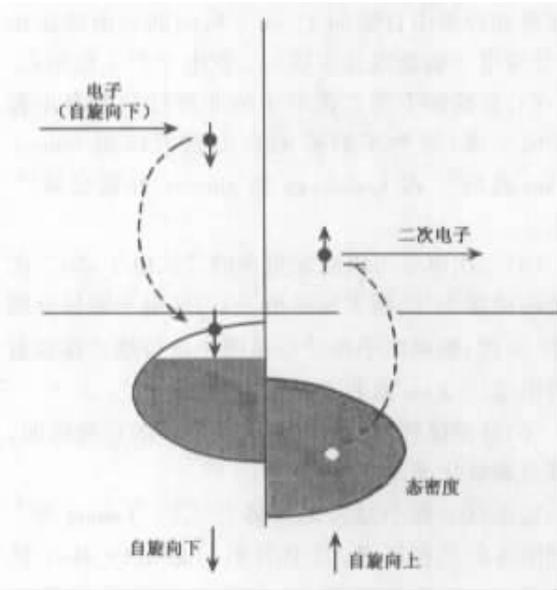


图4 自旋反转非弹性散射示意图^[5]

对于自旋极化的二次电子可以用 Mott 极化探测器探测, Koike 和 Hayakawa^[7]利用常规 SEM 和 Mott 探测器得到硅钢片磁畴像,为了提高探测效率,需要将二次电子加速到几十 keV 能量^[8].

4 自旋极化低能电子显微术^[9]

低能电子显微镜 (LEEM)^[10]在超高真空中利用低能电子束从固体表面的反射电子成像,它的横向分辨率为 10nm,纵向分辨率达原子级.其小型化的装置可以直接接入表面分析装置^[11].它的入射电子束可以由常规的 LaB₆ 产生,也可以是由 GaAs 光电极发射的自旋极化的电子束^[12].

GaAs 经圆偏振单色光(光子能量和能带隙匹配)后可产生纵向自旋极化的电子束.得到自旋极化电子的关键因素是 GaAs 价带的自旋-轨道劈裂,如图5所示.在图中的 Γ 点,简并的 P 带劈裂成四重简并的 $P_{3/2}$ 和二重简并的 $P_{1/2}$ 能级,两者之间能量差为 0.34eV.对 σ^+ 圆偏振光(图中实线),有 $\Delta m_j = +1$;对 σ^- 圆偏振光(图中虚线),有 $\Delta m_j = -1$.计算表明,电子在各态间的跃迁几率不一样^[13],如对能量 $\hbar\omega \sim E_g$ 的 σ^+ 光,从 $m_j = -3/2$ 价带到 $m_j = -1/2$ (导带)的电子是从 $m_j = -1/2$ 到 $m_j = +1/2$ 态的电子的 3 倍,图中用画有圆圈的数字表示相对几率.定义自旋极化率为 $P = (\delta_+ - \delta_-) / (\delta_+ + \delta_-)$,这里的 δ_+ 和 δ_- 是自旋平行和反平行于光方向的电子数.这样对 σ^+ 光理论上 $P = -50\%$,而对 σ^- 光, $P = +50\%$,自旋极化方向发生反转.实际上,由于一些退极化因素的影响,一般得到的极化率仅为 25%—30%.

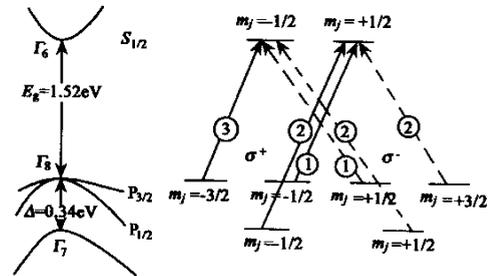


图5

左边为 GaAs 在布里渊区中心(Γ 点)的能带,带隙为 1.52eV,价带自旋-轨道劈裂为 0.34eV;右边是圆偏振光 σ^+ (实线)和 σ^- (虚线)在 m_j 子能级间允许的跃迁,画有圆圈的数字给出相对几率

自旋极化方向反转可以分别得到自旋向上和自旋向下的 LEEM 像,它们主要显示样品表面的几何形貌,如单原子层的台阶等等.利用非对称信号 $(1/P)(I_+ - I_-)/(I_+ + I_-)$ 可以得到磁畴的像,这里 I_+ 和 I_- 分别是自旋向上和自旋向下的反射强度,

I_+ 和 I_- 相减后几何形貌像相互抵消,而样品中磁化对入射电子强度的不对称影响可以显示出来.这种影响可以用样品磁化矢量(和表面法线平行或反平行)和入射电子自旋极化矢量的点乘表示.图6是原位蒸发沉积的 Fe/Cu(100)样品各阶段中得到的磁畴的系列像(电子能量为 1.8eV)^[12],它们分别对应于 Fe 层的不同厚度.图中的 LEEM 强度是由一种自旋 LEEM 像内各点强度积分得到的,它也就是反射束的总强度.此强度的各个峰值和蒸发量达到整数单层 (ML) 时对应. Fe 膜厚 2ML(t_c) 时磁畴消失,说明此时发生了相变,因为居里点已降至室温以下.

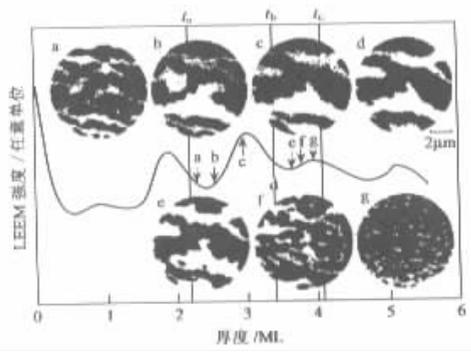


图6 Fe/Cu(100)膜生长过程中的磁畴像^[12]
(图中垂直线表示磁性开始 t_0 、磁性分裂 t_b 、磁性完全消失 t_c)

Bauer 等^[14]在 6ML - Co/W(110)中观察到类似的结果.当入射电子束的自旋极化矢量 S 平行或反平行磁畴中的磁化矢量 M 时,LEEM 主要显示表面形貌,两者相减后主要显示磁畴结构. $M \perp S$ 时,两种像相减后主要显示畴界. Tober 等^[15]在 118K 的低温下得到了 4.7ML - Co/Au(111)的 SPLEEM 磁畴像,横向分辨率达 31nm.

5 自旋极化电子散射的蒙特卡罗模拟

图7是入射一次电子及二次电子在铁磁性固体中散射的示意图.为简单起见,先设一次电子非自旋极化,并在蒙特卡罗模拟中考虑以下的简化散射过程:

- (1) 经过一定路程后发生弹性散射,电子运动方向发生变化,飞程 s 的几率分布为泊松分布,即 $\sim e^{-s/\Delta}$,其中 Δ 为弹性散射平均自由程,它和弹性散射总截面成反比,弹性散射角分布按前面所述的卢瑟福或 Mott 微分散射截面给出.
- (2) 在各段路程上应用能量连续慢化近似(忽略

非弹性散射引起的运动方向的变化),适当选定二次电子产生所需的平均能量,计算出每段飞程上产生的二次电子,设定随机均匀分布的二次电子产生点和二次电子运动方向.二次电子能量按 Streitwollff 公式分布^[16].

(3) 磁性材料中二次电子自旋向上或自旋向下的概率和导带中自旋向上、向下取向的比值成正比(设导带电子的激发是主要的二次电子产生机制).

(4) 自旋向下的二次电子的非弹性散射自由程低于向上者,这种不对称的自由程可以用 Born - Ochkur 近似^[17]和 Koshikawa 和 Shimizu 经验公式^[18]给出.

(5) 二次电子可以激发更多的二次电子,如二次电子的能量为 E ,激发导带电子后,两电子能量分别为 E' 和 E'' ,则两电子在质心系统中进行球对称散射可得出 $E' = E \cos^2 \theta$ 和 $E'' = E \sin^2 \theta$.

(6) 分别统计逸出表面的二次电子的自旋取向,得到自旋极化率.

给出以上各个过程的具体公式后, Yasuda 等^[6]得到图8的模拟结果.其中图8(a)是 0.1—4keV 能量电子以 48°角入射到 Fe 中的二次电子产额和 20eV 二次电子的极化率,大体上和 Paul 等^[19]的实验结果一致.图8(b)是 2keV 电子以 50°角入射到 Fe 中引起的二次电子极化率随二次电子能量的变化,它随二次电子能量的增大而下降,并和 Kirschner 等^[20]的实验结果大体上一致.10eV 以下二次电子极化率模拟值比实验值偏低,原因可能是没有考虑固体导带结构引起的自旋反转效应.

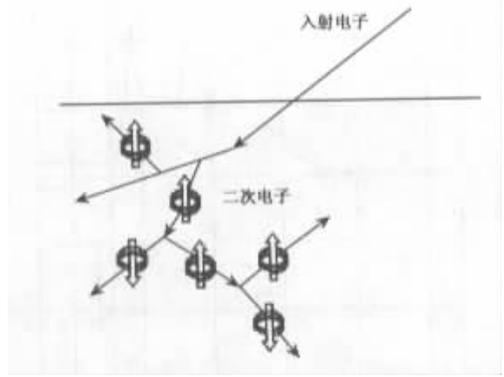


图7 蒙特卡罗模拟中考虑二次电子自旋方向时的电子轨迹模型^[6]

固体中电子散射过程十分复杂,上述模拟中尚待改进之处较多.例如非弹性散射可以用丁泽军

薄膜磁结构的自旋极化电子显微术,由于它和磁学、表面物理、电子学、显微学等学科进行交叉,因而具有广泛的应用前景,值得人们给予密切的关注。

参 考 文 献

- [1] 吴自勤,王兵.薄膜生长.北京:科学出版社,2001.第十章 [Wu Z Q,Wang B.Thin Film Growth.Beijing:Science Press,2001 (in Chinese)]
- [2] Mott N F.Proc. R. A.,1929,124 :425
- [3] 孙霞,王兵,王丽娟等.物理,2002,31(9):572[Sun X,Wang B,Wang L J et al.Wuli(Physics) 2002 31(9) 572(in Chinese)]
- [4] Kotera M,Tamura K.Jpn. J. Appl. Phys. ,1996,35 :6614
- [5] Tamura K,Yasuda M,Murata K et al. Jpn. J. Appl. Phys. ,1998,37 :7028
- [6] Yasuda M,Tamura K,Kawata H et al. J Phys. D :Appl. Phys. ,2001,34 :1955
- [7] Koike K,Hayakawa K. Appl. Phys. Lett. ,1984,45 :585
- [8] Hopster H,Raue R,Kisker E et al. Phys. Rev. Lett. ,1983,50 :70
- [9] Bauer E. Rep. Prog. Phys. ,1994,57 :8951
- [10] 孙霞,丁泽军,吴自勤.电子显微学报,2001,20 :251[Sun X,Ding Z J,Wu Z Q.J. Chin. Electr. Microsc. Soc. 2001,20 :251(in Chinese)]
- [11] Grzelakowski K,Bauer E. Rev. Sci. Instrum. ,1996,67 :742
- [12] Man K L,Altman M S,Poppa H. Surf. Sci. ,2001,480 :163
- [13] Pierce D T,Meier F. Phys. Rev. B,1976,13 :5484
- [14] Bauer E,Duden T,Pinkvos H et al. J. Magn. Magn. Mater. ,1996,156 :1
- [15] Tober E D,Witte G,Poppa H. J. Vac. Sci. Technol. A,2000,18 :1845
- [16] Streitwolf H W. Ann. Phys. ,1959,3 :183
- [17] Matthew J A D. Phys. Rev. B,1982,25 :3326
- [18] Koshikawa T,Shimizu R. J. Phys. D :Appl. Phys. ,1974,7 :1303
- [19] Paul O,Taborelli M,Landolt M. Surf. Sci. ,1989,211/212 :724
- [20] Kirschner J,Koike K. Surf. Sci. ,1992,273 :147
- [21] Ding Z J,Shimizu R. Scanning,1996,18 :92

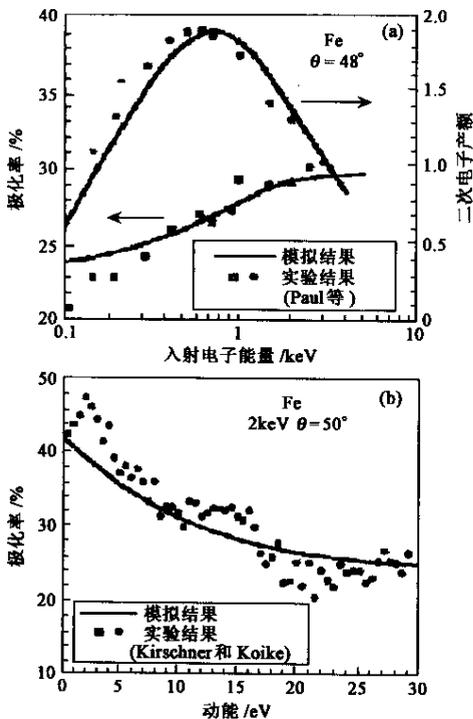


图 8

(a)从 Fe 中出射的二次电子自旋极化率和产额随入射电子能量的变化(蒙特卡罗结果与 Paul 等的实验结果相比较)(b)从 Fe 中出射的自旋极化的二次电子的能量分布(蒙特卡罗结果与 Kirschner 和 Koike 的实验结果相比较)

等^[21]使用过的实验能量损失函数作为基础的微分非弹性散射截面,散射电子的运动方向和自旋可以因磁畴中磁场的洛伦兹力而改变.Tamura 等^[5]考虑了洛伦兹力和自旋轨道相互作用。

·物理新闻·

自组装的纳米管网络(Self-Assembled Nanotube Networks)

在纽约附近的富人住宅区,如果从他们居住的后窗户望出去,就能看到无数矗立的电线杆以及悬挂在杆上的电话线.现在在纳米量级上也能组装这样的网络。

日本电报电话总公司(NTT)的科学家 Yoshikazu Homma 先生已经能用标准的印刷电路技术生产出一种芯片,在它上面安置着一批只有纳米宽的硅支柱,在这些硅柱之间悬挂着一串串像蜘蛛网似的碳纳米管,电流在纳米管中流通.这类芯片的功能主要是可以在各种纳米装置中建立起相互联系.如果在装配上使用纳米晶体管的话,那么它就可以作为能进行自学习的神经网络的设备。

碳纳米管的电性质具有多样性,例如我们利用掺杂技术就能使碳纳米管成为 N 型或 P 型的半导体.现在人们更加关注金属性纳米管,因为这种管子甚至在室温条件下,管内电子的轨迹仍能保持直线,从而大大降低了散射带来的能耗.另一方面,在悬挂的碳纳米管间的光子作用也已经引起了人们的注意。

(云中客摘自 Appl. Phys. Lett. ,16 September 2002)