

國立新竹科學園區實驗高級中等學校 113 學年度科學展覽
作品說明書

科別：物理與天文

組別：高級中等學校組 / 國中組

作品名稱：AED 歐傑電子繞射的材料分析技術之探究

關鍵詞：AED 、 材料分析 、 波粒二象性 （最多 3 個）

編號：

作品名稱：AED 歐傑電子繞射的材料分析技術之探究

摘要

本研究旨在探討波粒二象性與光電效應。我們透過歐傑電子繞射 (Auger Electron Diffraction, 簡稱 AED) 的技術來分析材料的結構，以獲取材料的能譜資訊。接著撰寫 python 程式碼進行數據模擬，模擬材料的電子干涉與繞射現象，與實驗結果進行比對，以驗證 AED 技術在量子物理研究中的應用。此研究不僅深化了我們對電子的波動特性的理解，也開拓了透過 AED 技術研究單晶材料結構的新方法。

壹、前言

一、研究動機

我們在高一的物理課程中曾學過「波粒二象性」的概念，物體在足夠微小的尺度下將出現波動性。以電子來說，在微小尺度下，其將顯示波的性質，並發生干涉或繞射行為，而這種特性已被廣泛運用於近代材料研究。這個「是粒子也是波」的概念有些顛覆我們的認知，為了更進一步理解電子的量子特性如何被運用在科學研究中，並親自驗證波量子概念，我們與國家同步輻射中心的幾位教授合作一同著手電子等級的研究。在進一步了解材料科學的研究技術時，我們得知同步輻射中心目前尚未配備 X 射線光電子能譜 (XPS) 設備，但已經具備歐傑電子能譜 (AES) 技術，因此我們決定利用 AES 來分析材料的電子結構與繞射現象。AES 與 XPS 同樣都能提供材料表面的元素與化學組成資訊，但 AES 更具有高表面靈敏度，特別適合分析奈米材料或單層結構的材料。量子物理為現代科學的核心領域之一，我們非常期待能夠使用這項技術，一方面認識科學研究中的技術，另一方面驗證過去所學的知識。

二、研究目的

本研究旨在探索電子的波動性，並透過 歐傑電子能譜 (AES) 技術與 Python 模擬，驗證電子繞射現象於材料分析中的應用。我們的具體研究目標如下：

- (一) 完整認識 AES 技術並理解其運作原理
- (二) 使用 AES 獲取二硫化鉬 (MoS_2) 的能譜結果
- (三) 使用 Python 建立電子繞射模擬之理論模型
- (四) 比較模擬將實驗數據，驗證電子之波性

三、文獻回顧

- (一) 電子的波粒二象性

波粒二象性為量子力學中的核心概念，也是本研究的核心理論基礎。其指的是微觀粒子同時展現出波動性和粒子性。此概念最初由物理學家路易·德布羅意於 1924 年所提出，他假設所

有物質皆具有波動性，並提出了德布羅意波長公式（de Broglie, 1924）：

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

λ 為波長， h 是普朗克常數， p 為動量， m 為質量， v 為速度。

此理論已被後續的多項實驗證實，如戴維森-革末實驗成功觀察到電子在晶體表面的繞射現象（Davisson & Germer, 1927）。

（二）光電效應、X 射線螢光與歐傑電子

1. 光電效應

撞擊材料時，材料內部的電子可能會吸收光子的能量，克服材料的功函數 ϕ （work function），並被激發逸出，形成光電子（Photoelectron）。此現象由愛因斯坦於 1905 年成功解釋，他提出了愛因斯坦光電方程式（Einstein, 1905）：

$$E_k = h\nu - \phi$$

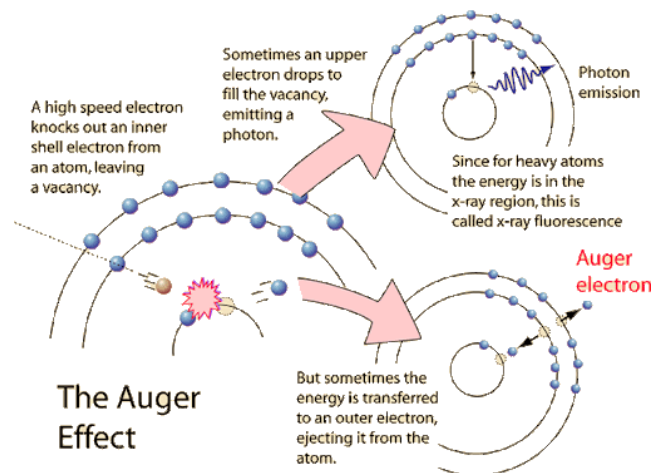
E_k 是逸出電子的動能， $h\nu$ 是入射光子的能量， ϕ 是功函數。

2. X 射線螢光與歐傑電子

當高能電子束撞擊材料時，材料內部的電子會被激發並逸出，形成初級電子。原子內層留下了電子空洞，而為了回復到穩定狀態，原子內的高能階電子將向下躍遷以填補空缺，並在過程中釋放出一段多餘的能量。這段能量有兩種可能的去向，造成不同效應（如圖一）：

（1）X 射線螢光（X-ray Fluorescence）：能量以 X 光光子的形式釋放，此 X 光被稱為特徵 X 射線（Characteristic X-ray）（Briggs & Seah, 1990）

（2）歐傑效應（Auger Effect）：能量傳遞給外層電子，使其從原子逸出，形成歐傑電子 Auger Electron（Auger, 1925）。與光電效應不同的是：光電效應所發出的光電子能量與入射光子能量有關，呈現連續分佈，而歐傑電子或 X 射線螢光的能量僅與材料內部的電子能階有關（Seah & Dench, 1979）。AES 分析的重點便是測量這些歐傑電子的能量分佈與資訊。



(圖一) 歐傑效應 (HyperPhysics)

(三) 電子在晶格中的繞射行為

1. 繞射 Diffraction

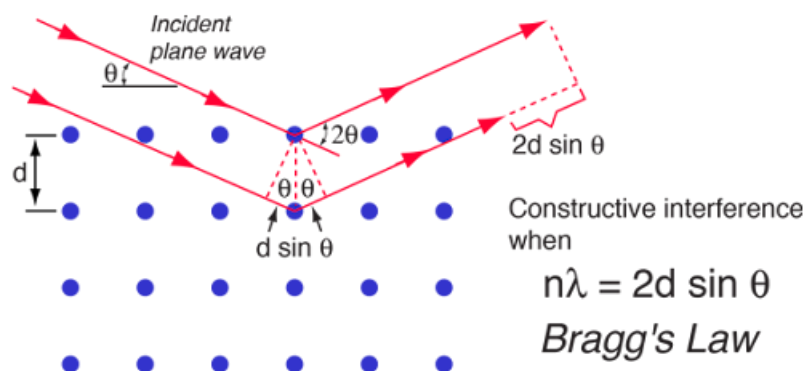
波在遇到障礙物或是狹縫時，會在障礙物後方彎散傳播，也就是彎曲、繞過障礙物，並非以直線傳播。繞射現象發生在電磁波、聲波、水波與電子波等等，且當障礙物的尺寸與波長相近時，繞射現象將非常明顯。(Born & Wolf, 1999)

2. 電子在晶格中的繞射

根據前面所提到的德布羅意物質波理論，電子在微觀世界中具有波動性，且波長可依普朗克常數與電子動量推出。當電子束穿越過一些縝密排列的結構如晶格時，電子波將發生繞射，而來自不同原子層的電子波會互相疊加，並滿足滿足布拉格定律 Bragg's Law (Bragg, 1913)：

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

n 為繞射階數， λ 為波長， d 為晶格面間距， θ 為入射角



(圖二) 布拉格定律(HyperPhysics)

在一些特定角度 θ 下，能使繞射階數為整數，相位相同時，整體疊加最強，產生繞射峰。

（四）雙狹縫實驗 Young' s Double-Slit Experiment

雙狹縫實驗最初由湯姆士·楊於 1801 年所提出 (Young, 1802)。，當電子通過兩條狹縫後，其波函數疊加，形成干涉條紋，即便單顆電子逐次通過，最終仍會累積出干涉圖樣 (Jönsson, 1961)。雙狹縫實驗的強度分佈可由以下公式描述 (Hecht, 2001)：

$$I(x) = I_0 \cos^2 \left(\frac{\pi dx}{\lambda L} \right)$$

$I(x)$ 為屏幕上位置 x 的強度， I_0 為最大強度， d 為狹縫間距， L 為狹縫到屏幕的距離， λ 為電子的波長。

此公式將提供我們程式模擬的重要物理模型，如果考慮單狹縫繞射的影響，該公式將修正為 (Hecht, 2001)：

$$I(x) = I_0 \cos^2 \left(\frac{\pi dx}{\lambda L} \right) \times \left(\frac{\sin(\beta)}{\beta} \right)^2$$

$$\beta = \frac{\pi ax}{\lambda L} \quad \text{且 } a \text{ 為單個狹縫的寬度。}$$

（五）動量空間

動量空間為三維空間中所有物體的動量向量集合，一個粒子在動量空間中的位置由其動量向量 $\vec{p} = (px, py, pz)$ 所決定 (Sakurai, 1994)。

如果一個粒子在實空間中的波函數為 $\psi(\vec{r})$ ，則其在動量空間中的對應波函數 $\phi(\vec{p})$ 可透過傅立葉轉換獲得 (Griffiths, 2018)：

$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3r$$

在材料學中，動量空間被運用在解析材料的電子結構、晶體結構以及物理性質等方面。在晶體學中，動量空間與倒空間等價，可以用於描述晶格的週期性 (Ashcroft & Mermin, 1976)，而布拉格繞射條件也可以以動量空間的形式表達。在歐傑電子繞射中，電子被內層能級躍遷釋放出來後，與晶體表面原子的排列產生干涉，其動量變化揭示晶體表面的排列情況 (Briggs & Seah, 1990)。

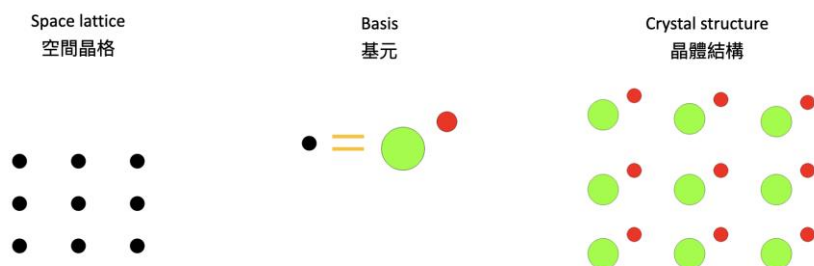
（六）晶體學

為了後續在程式中順利模擬特定晶格的結構，我們必須先瞭解如何以數數學方式描述晶格。

1. 基本晶體結構

所謂晶體結構 (Crystal Structure)，由晶格 (Lattice) 和基元 (Basis) 組成 (Kittel, 2004)：

- (1) 晶格：重複排列的點陣
- (2) 基元：每個晶格點上的原子或分子



(圖三) 晶體結構要素(C.M Liu)

晶格可以用向量來描述，每個晶格點的位置 \mathbf{R} 以三個晶格向量 (基底) $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 的線性組合呈現：

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

2. 晶胞 Unit Cell

晶胞為最小的晶體結構單元，可以透過平移來表示整個晶體結構，即我們所知的單位晶格 (Ashcroft & Mermin, 1976)。而晶胞又可分為

- (1) 原始晶胞 (Primitive Unit Cell)：取最小的重複單元
- (2) 常規晶胞 (Conventional Unit Cell)：比原始晶胞大的單位

在重建晶格的時候，利用晶胞平移來完成能夠簡化計算，如果要一個個處理每個原子的話，計算量會太過龐大，若研究一個晶胞內的原子，再推廣到整個晶體將快速、容易許多。

3. 晶格向量

晶格可以用向量來描述，每個晶格點的位置 \mathbf{R} 以三個晶格向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 的線性組合呈現：

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

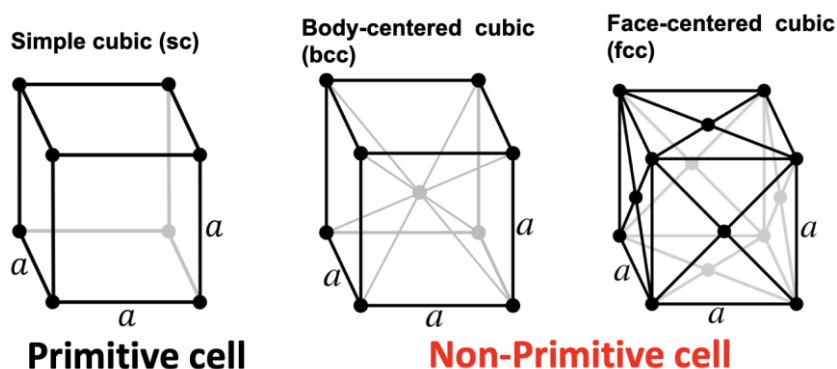
例如：

- (1) 簡單立方 (SC) 晶格向量為 $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$, $\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$
- (2) 面心立方 (FCC) 晶格向量為 $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1)$, $\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)$

4. Bravais 晶格

Bravais 晶格為依照對稱性，所有不同類型可能的晶胞排列方式，三維的 Bravais 晶格共有 14 種，一般可由七大晶系來討論 (Ashcroft & Mermin, 1976)，如 (表一)：

晶系	Bravais 晶格
立方 (Cubic)	簡單立方 (SC), 體心立方 (BCC), 面心立方 (FCC)
四方 (Tetragonal)	簡單四方, 體心四方
正交 (Orthorhombic)	簡單正交, 體心正交, 面心正交, 底心正交
單斜 (Monoclinic)	簡單單斜, 底心單斜
三斜 (Triclinic)	簡單三斜
六方 (Hexagonal)	六方最密堆積 (HCP)
菱方 (Rhombohedral)	菱方晶格 (Rhombohedral)

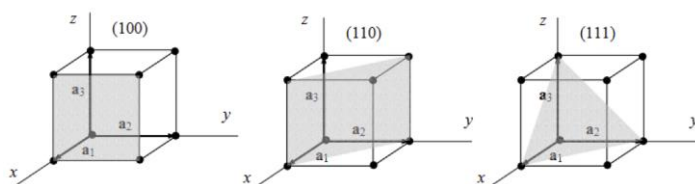


(圖四) SC, BBC, FCC 晶細胞(wikipedia)

5. 晶體指數 Miller Indices, hkl

不同的晶面會有不同的排列、光學、繞射性質等等，為了描述晶面，我們可以使用晶體指數 hkl，以空間中的截距式來表示 (Kittel, 2004)，以下為計算 hkl 的方式：

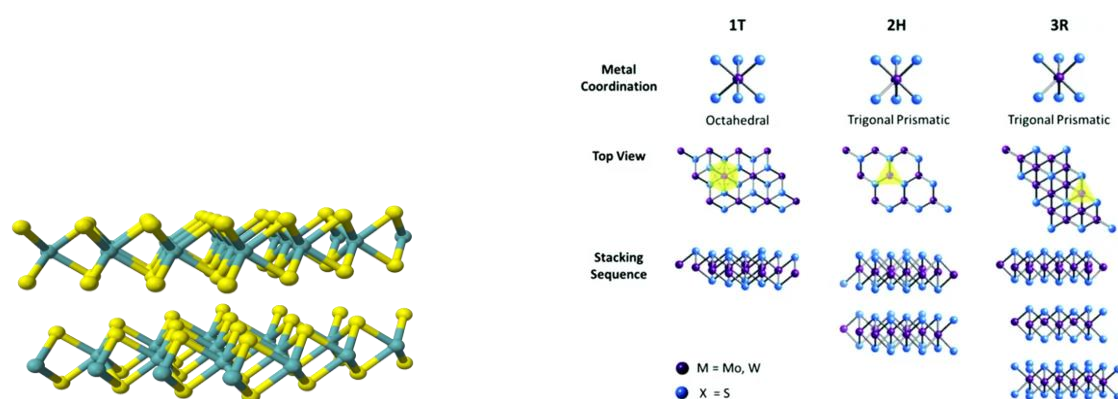
- (1) 晶面與 x 、 y 、 z 軸的截距為 (a, b, c)
- (2) 計算截距倒數 $\left(\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}\right)$
- (3) 取最小公倍數，將結果化為整數 (h, k, l)



(圖五) 不同種晶面(By E.Y.Tsymbol)

(八) 二硫化鉬 MoS_2 的介紹

本研究中，我們選取的樣本材料為二硫化鉬 (MoS_2)，其化學活性較低因此不容易被氧化，同時一般不溶於水、酸、鹼及有機溶劑中。其所有晶體皆為層狀晶體，由兩層硫原子平面夾著一層鉬原子平面形成 S-Mo-S 三層結構，並以此堆疊出二硫化鉬 (MoS_2) 晶體，另外層與層之間透過凡德瓦力相連，使其易於剝離成單層或少層結構 (Chhowalla et al., 2013)。二硫化鉬 (MoS_2) 晶體有不同的相，例如: 2H 相、3R 相、1T 相，他們各自擁有不同的性質及特徵。在實務上，二硫化鉬 (MoS_2) 因為上述的層狀結構與它本身的低摩擦力係數使之常被用作固體潤滑劑來使用。也因其獨特的電學、光學與機械性質，使之被廣泛應用於半導體、能源儲存、催化等領域，並被視為石墨烯之後的熱門 2D 材料之一 (Epitaxial Growth Study, 2023)。



(圖六) 二硫化鉬球棍模型、二硫化鉬之 1T、2H、3R 相 (Published by The Royal Society of Chemistry)

貳、研究設備及器材

此研究專題於國家同步輻射中心內進行，我們所使用的研究儀器與器材包括：

- 一、硬體：歐傑電子能譜儀、電腦
- 二、軟體：Spyder 環境

參、研究過程或方法

一、歐傑電子能譜儀的基本原理與應用

(一) 歐傑電子能譜儀 AES 的原理

1. AES 系統的結構：

- (1) 電子槍
- (2) 真空設備
- (3) 能量分析器
- (4) 歐傑電子探測器
- (5) 離子濺射槍

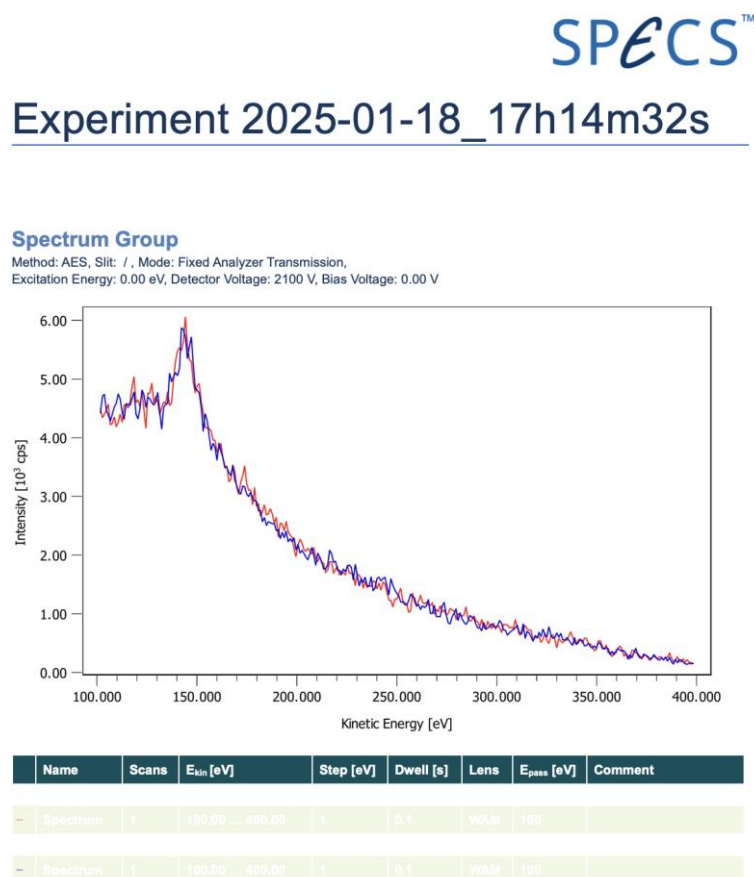
2. 基本過程有：

- (1) 電子槍發出電子束照射樣品
- (2) 測量發射出的歐傑電子之能量與強度

- (3) 根據歐傑電子能量識別元素，並根據其強度確定元素的含量
- (4) 通過離子束濺射去除表面層，然後進行 AES 分析，可以獲得元素在不同深度的分佈情形。離子束通常由惰性氣體

結果將獲得能譜圖：

- (1) x 軸會是動能，y 軸將代表強度大小
- (2) 每個歐傑峰值對應著不同元素的歐傑電子能量



(表二) 兩次二硫化鉬 AES 實驗結果能譜

第一個峰值（150eV 附近）對應於光電子發射，並非我們目標的歐傑電子訊號。我們要關注的是第二個峰值（175eV 附近），它理論上應出現在靠近硫（S）峰值能量附近，並且應該要再更加明顯。此實驗結果無法被採用，因為當時儀器的數學模型並不正確，其中存在許多誤差。

(二) 歐傑電子能譜儀的應用

AES 因為其分析表面元素以及分析元素分布深縱的能力使得它在表面研究工作及半導體工業上有相當廣泛的應用，其具體應用如下：

1. 氧化層表面分析

在研究 Si/SiO₂ 介面時，常透過 AES 得知 SiO₂ 表面歐傑電子的峰值能量位置及峰值形狀，並以此判斷 Si 原子是與 O 原子還是 Si 原子鍵結，某些情況下也可能與氮原子或氫原子結合。

2. 異質界面分析

異質界面是由兩層以上不同的半導體材料薄膜依次沉積在同一基座上形成，藉由異質界面可以製造出許多過去無法實現的元件。

3. 界面深縱分析

AES 可應用在分析某種原子在各層間的變化情形，並透過深度分析(AES Depth profile)來估算出界面轉換層的厚度，這對於成長高品質元件很有幫助。

(三) 歐傑電子能譜儀的優點與局限性

1. 優點：

- (1) 表面敏感性：歐傑電子能量低，適合深度 3~5nm 的材料分析
- (2) 可識別元素特徵：每種元素具有自己獨特的歐傑電子能量。

2. 侷限：

- (1) 不能區分同位素：歐傑電子的能量主要由原子的束縛能決定，同位素的原子序相同，不同的中子數造成的束縛能差異小，歐傑電子的能量差也極小，使 AES 無法分辨。
- (2) 反覆進行離子濺射容易造成樣品損壞：
- (3) 分析深度有限（算是表面靈敏導致的間接限制）：歐傑電子的能量較低（幾十～幾千 eV），因此叫較深層的電子在經過固體時容易被吸收或散射。

二、歐傑電子能譜儀之操作方式

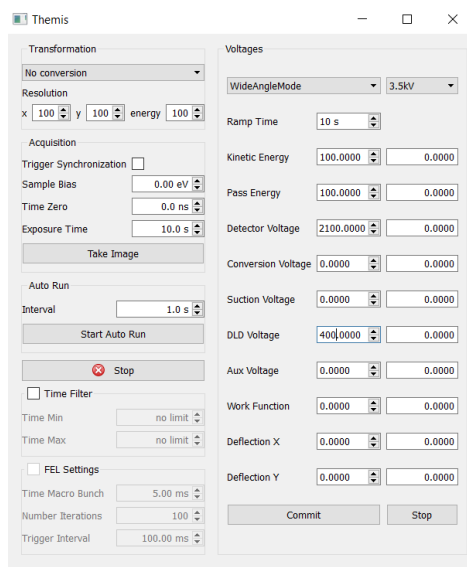
歐傑電子能譜儀之運作方式如下

- (一) 調整電子槍的位子使其對準樣品
- (二) 用電子槍將電子射入樣品表面使之釋放出歐傑電子
- (三) 歐傑電子通過微通道板(microchannel plate, MCP)使其訊號放大
- (四) 由 DLD (Delay Line Detector) 測量歐傑電子分布

三、獲取實驗數據

(一) 調整儀器參數

- 1. 調整電子槍的 X、Y、Z 軸來使之對準樣品
- 2. 調整電子槍的電壓、電子動能等參數使測量結果更明顯



(圖七) 電子槍及 detector 參數

(二) 實際操作 AES

我們在用 AES 做實驗時，會照以下步驟獲得歐傑電子的資訊：

1. 用電子槍將電子射入樣品(MoS₂)表面，使外層的歐傑電子被激發出來
2. 因 AES 儀器以繞射圖案分析，故其需接收整個樣品的資訊，又 AES 接收器僅能每次接收 30 度的樣品資訊。所以我們需要旋轉樣品角度直至完整訊號被接收。
3. 將測得的數據用電腦轉換成能譜圖
4. 調整曝光時間 (Exposure Time) 後再做一次實驗以得到更完整的數據

四、儀器損壞

由於歐傑電子能譜儀是同步輻射中心新購入的儀器，在我們專題期間遇到了許多硬體損壞、軟體維修中的情形。除了先著手進行程式研究的部分，我們也進行了幾次輔助維修的過程。例如：

- (一) 更換樣品管之零件
- (二) 重新連接電線及更換面板
- (三) 將儀器回復到真空環境

這部分我們採用的方法為反覆充氮和抽氣，的為代替大氣中的氧氣、水蒸氣等活性氣體，減少污染物殘留。氮氣為惰性氣體，不易與腔壁或樣品反應，有助於保持腔體清潔。接著進行真空排氣，將儀器內部抽真空，降低氣體造成的實驗誤差。我們先用粗真空幫浦將壓力降低到粗真空(約 10^{-1} 至 10^{-3} Pa)，再用高真空幫浦慢慢將壓力降低到超高真空範圍 (約 10^{-7} 至 10^{-8} Pa)。

目前儀器同樣是處於維修中的狀態，等待德國的廠商接洽中，這使我們在實驗數據採集的階段受到嚴重影響，過去幾次的數據結果也因為當時的數據模型錯誤而作廢。在等待儀器恢復期間，我們決定先著手進行程式的開發、模擬。

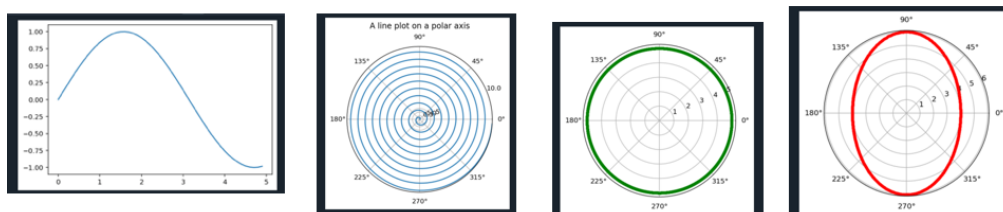
五、編寫程式

(一) 學習 Python 語法與繪圖

我們使用寫程式所使用的工具為 Spyder 軟體，開始熟悉 Python 語言，並進行以下操作：

1. 使用一些基本迴圈
2. 引入了 matplotlib.pyplot 來繪圖功能
3. 並嘗試使用 math 和 numpy 資料庫進行運算

先嘗試繪製了如圓、橢圓、阿基米德圓、sin 函數圖形等等。



(圖八) Python 繪製函式圖形

(二) 原子模型模擬

我們先嘗試使用 Atomic Simulation Environment 套件 (ASE) 來完成原子的模擬。ASE 是一個開源的 Python 庫，我們使用它進行了以下三種類型的模擬：

1. 簡單氣體模型 (如 H_2 、 O_2 、 CO_2)

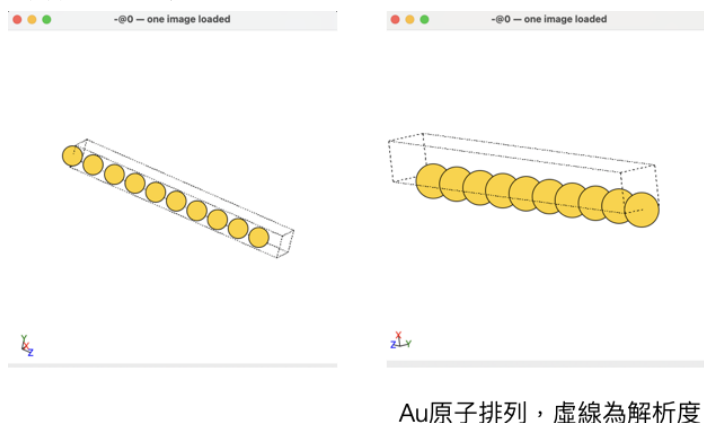
我們利用 ASE 定義氣體分子的種類和鍵長，並帶入其他參數如分子質心位置：



(圖九) 氮氣與二氧化碳 Python 模型

2. 金屬固體模型 (如 Cu、Al)

對於金屬固體，我們使用 ASE 中的 bulk 函數 (用於塊材結構)，並設定晶格常數、堆疊類型、原子數量、解析度大小等：

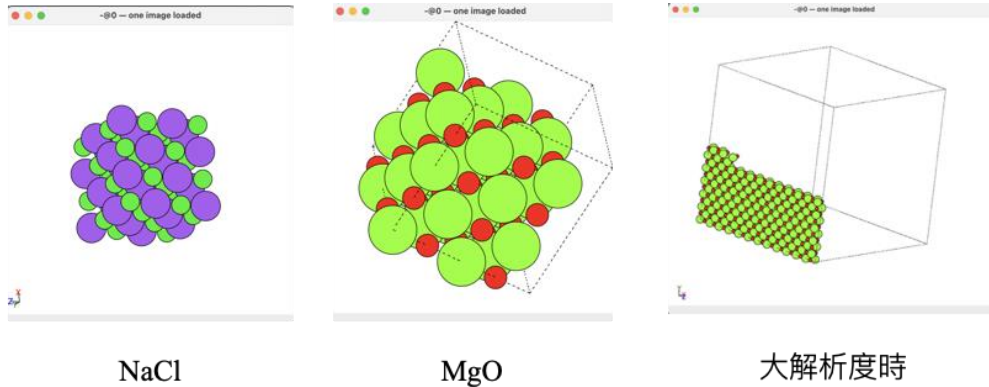


Au原子排列，虛線為解析度

(圖十) 金原子 Python 模型

3. 晶格排列 (如 NaCl、SiO₂)

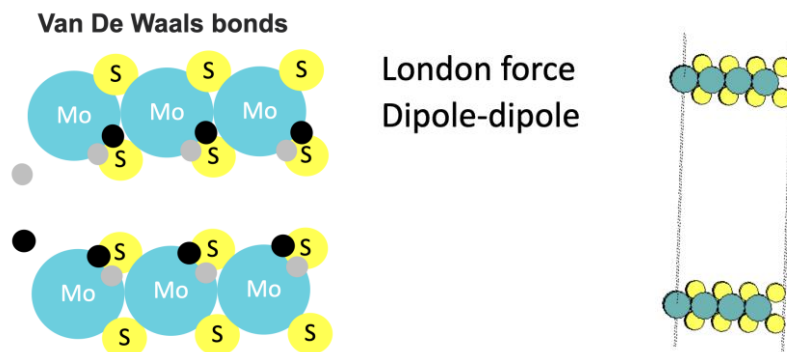
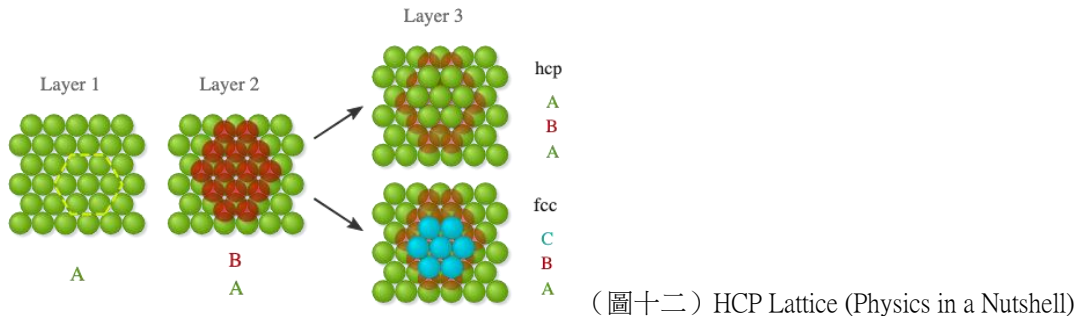
而對於晶體結構，我們必須考慮其他種排列方式如 rocksalt 結構：



(圖十一) 氯化鈉與氧化鎂晶格 Python 模型

(三) 模擬二硫化鉬 (MoS₂) 晶格

我們接著認識了晶格學中，用數學模型描述晶體結構的方式——Bravais Lattice。它定義了能夠通過平移來填滿整個空間的點陣排列，每個點代表原子、分子的位置。照 Bravais 晶格的分類，二硫化鉬 (MoS₂) 為六方密堆積 (HCP, Hexagonal Close-Packed)。



(圖十三) 二硫化鉬 Python 模型

模擬二硫化鉬 (MoS₂) 時無法使用 `bulk()` 函數，而必須使用 `mx2()` 函數，這是因為二硫化鉬 (MoS₂) 為六方晶格並具有層狀結構，具有原子間的凡德瓦力。`mx2()` 是用來專門模擬過渡金屬二硫族化合物 (TMDs) 的函式庫：

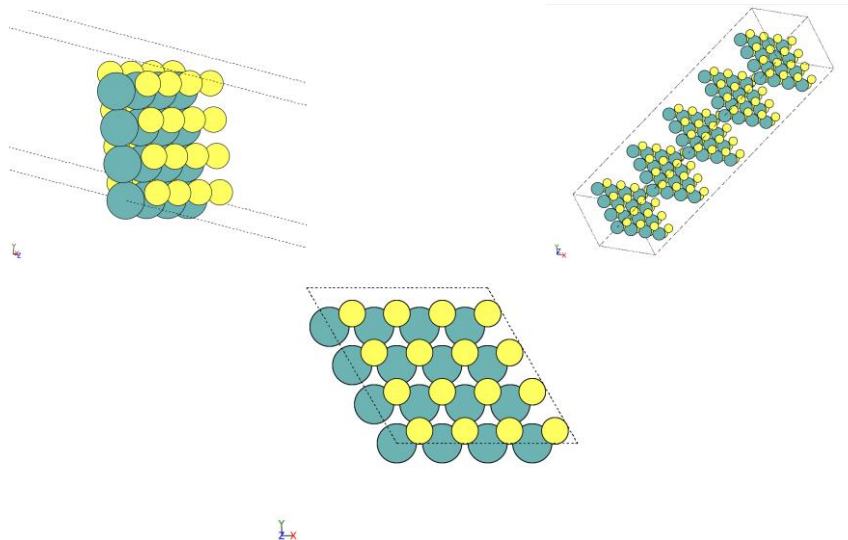
1. M 為過渡金屬，例如 Mo、W。
2. X 為硫族元素，例如 S、Se、Te。

我們運用 `mx2()` 函式生成單層的二硫化鉬 (MoS_2)，並進行 $4 \times 4 \times 5$ 擴展：

```

29 from ase.build import mx2
30 from ase.visualize import view
31
32 # Define lattice constant and structure parameters
33 a = 3.16 # Lattice constant for MoS2 (in Angstrom)
34 thickness = 3.2 # Thickness of MoS2 monolayer (approximated)
35 vacuum = 10.0 # Vacuum thickness along z-axis to avoid boundary interactions
36
37 # Generate a single-layer MoS2
38 atoms = mx2('MoS2', a=a, thickness=thickness, kind='2H', vacuum=vacuum)
39
40 # Repeat the structure to expand in X, Y, and Z directions
41 num_x = 4 # Number of repetitions along X-axis
42 num_y = 4 # Number of repetitions along Y-axis
43 num_layers = 5 # Number of layers along Z-axis
44
45 # Repeat the single-layer structure
46 atoms = atoms.repeat((num_x, num_y, num_layers))
47
48 # Visualize the multi-layer MoS2 structure
49 view(atoms)

```



(圖十四) 二硫化鉬 Python 模型 (各角度)

為了驗證二硫化鉬 (MoS_2) 模擬結構的準確性，我們利用 `ase.geometry` 函式庫中的 `get_distances` 函式，計算 Mo-S 的平均鍵長，看看是否與理論值符合：

理論值 - 2.4219 Å

計算結果 - Mo-S 平均鍵長: 2.4266 Å

理論值與模型的鍵長足夠相近，可知模型具有準確性。

(四) 繞射模擬

在確認二硫化鉬 (MoS_2) 模型正確後，我們進一步計算電子繞射條件。

1. 雙波干涉條紋

我們用簡單的程式模型模擬二維平面中雙波源的疊加、相消。在平面上，兩個波源 S_1 和 S_2 的總場值(field value)為：

$$\xi(x, y) = \sin(kr_1) + \sin(kr_2)$$

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 為波數， λ 為波長， r_1 和 r_2 是觀察點 (x, y) 到兩個波源的距離

- (1) 當 $\xi(x,y)$ 為正值，則為建設性干涉，產生亮紋
- (2) 當 $\xi(x,y)$ 為負值，則為破壞性干涉，產生暗紋

接著利用影像函式 `imshow()` 搭配灰階 `gray` 來顯示亮暗條紋，程式碼如下：

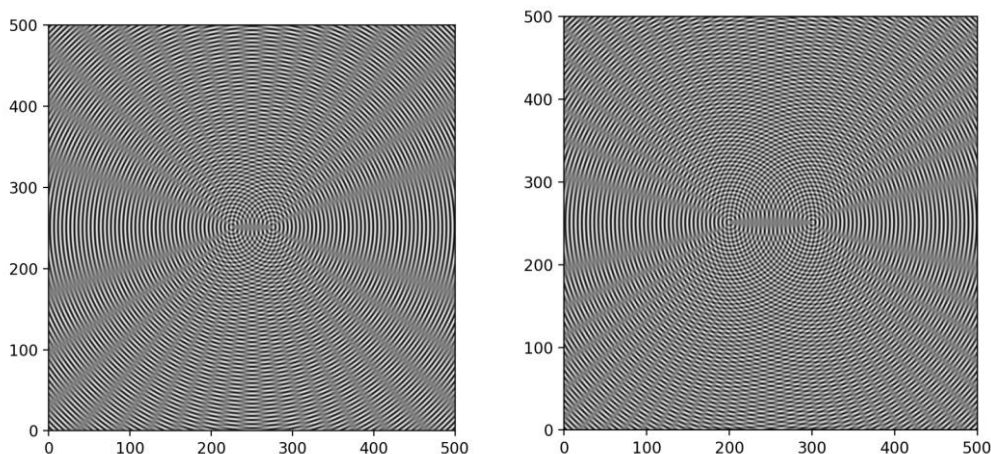
```

8  from numpy import empty
9  from math import sqrt, sin, pi
10 from pylab import imshow, gray, show
11
12 # 參數
13 wavelength = 5
14 k = 2 * pi / wavelength
15 xi0 = 1
16 separation = 100
17 side = 500
18 points = 500
19 spacing = side / points
20
21 # 圓心的位置
22 x1 = side / 2 + separation / 2
23 y1 = side / 2
24 x2 = side / 2 - separation / 2
25 y2 = side / 2
26
27 # 建立一個空陣列來存放數值
28 xi = empty([points, points], float)
29
30 # 計算陣列中的值
31 for i in range(points):
32     y = spacing * i
33     for j in range(points):
34         x = spacing * j
35         r1 = sqrt((x - x1) ** 2 + (y - y1) ** 2)
36         r2 = sqrt((x - x2) ** 2 + (y - y2) ** 2)
37         xi[i, j] = xi0 * sin(k * r1) + xi0 * sin(k * r2)
38
39 # 繪製
40 imshow(xi, origin="lower", extent=[0, side, 0, side])
41 gray()
42 show()

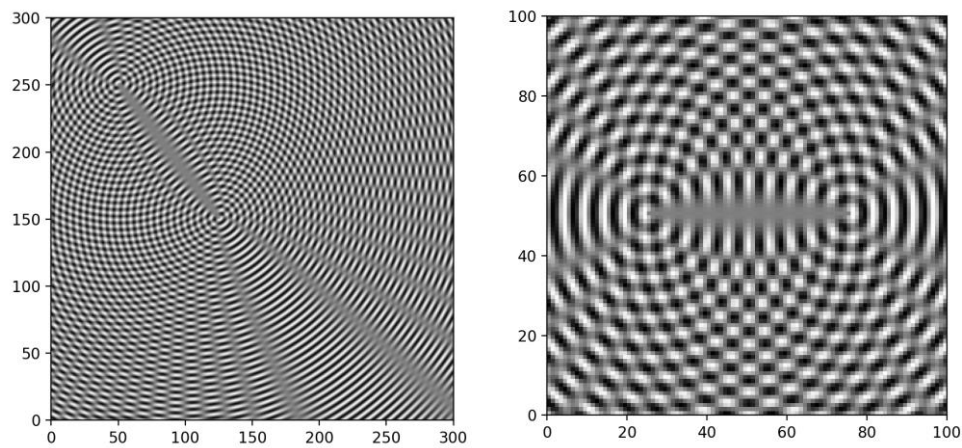
```

*特別註明：xi0 設定波的振幅為 1，side 定義模擬區域的寬度，points 定義網格大小（解析度），而 xi 為二維陣列，存放每點的場值。

我們可以調整各種參數，來得到我們想要的干涉條紋結果，產出如圖：



▲ 調整波源間距



▲ 調整波源位置、解析度
(圖十五) 雙波干涉之模擬圖

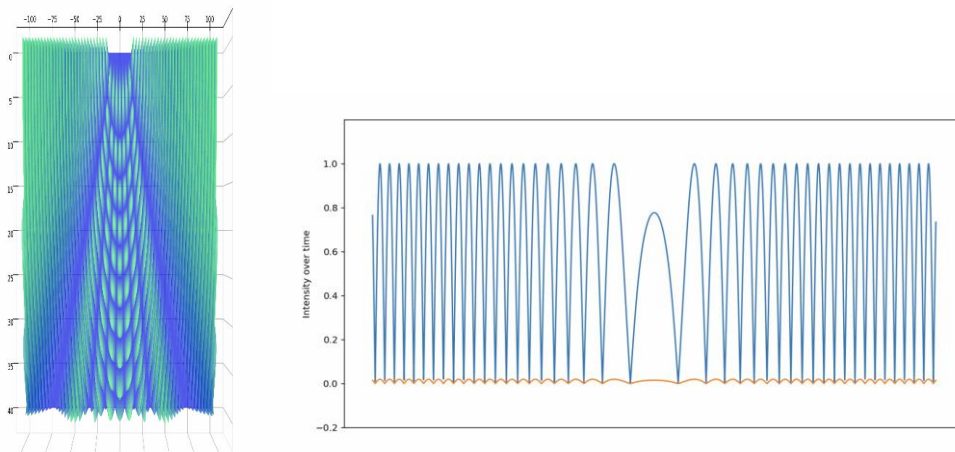
2. 雙狹縫實驗模擬 Young's Double-Slit Experiment

完成基本的雙波疊加後，我們將模擬更複雜的波動狀態。

我們將波動分為 4 種類型：

- (1) 單一波源的波動傳播 (single_wave)
- (2) 單狹縫繞射 (single_slit_diffraction)
- (3) 雙狹縫干涉但無繞射 (double_slit_no_diffraction)
- (4) 雙狹縫干涉並考慮繞射 (double_slit_diffraction)

依照同樣的方式計算總波場值，接著透過 matplotlib.animation 來生成 GIF 圖像。



(圖十六) 多重波干涉之模擬

(五) 光電子繞射模擬

光電子繞射 (Photoelectron Diffraction, PED) 為另外一種材料分析技術，主要分析光電子的能量。在模擬繞射圖時，由於歐傑電子的相關 Python Package 難以取得，我們先以 PED 進行

模擬，考慮光電子與周圍原子發生繞射。我們使用單次散射簇模型 Single Scattering Cluster (SSC Model)，假設：

1. 電子只發生一次散射，不考慮多重散射（只反射一次）
2. 散射後的電子會直接被探測器接收，不會再跟其他原子發生反彈
3. 電子波的繞射來自球面波散射 (Spherical-wave scattering)

以用來預測：

1. 光電子的強度變化
2. 不同散射方向的干涉條紋
3. 表面原子的排列資訊

SSC 的數學模型透過波函數疊加計算總強度：

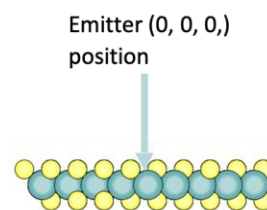
$$\psi(\vec{r}, \vec{k}) = \phi_0(\vec{r}, \vec{k}) + \sum_j \phi_j(\vec{r}, \vec{r}_j, \vec{k})$$

$\psi(\vec{r}, \vec{k})$ 為總波函數， $\phi_0(\vec{r}, \vec{k})$ 為初始化波函數， $\phi_j(\vec{r}, \vec{r}_j, \vec{k})$ 為第一次散射波函數

繞射強度計算：

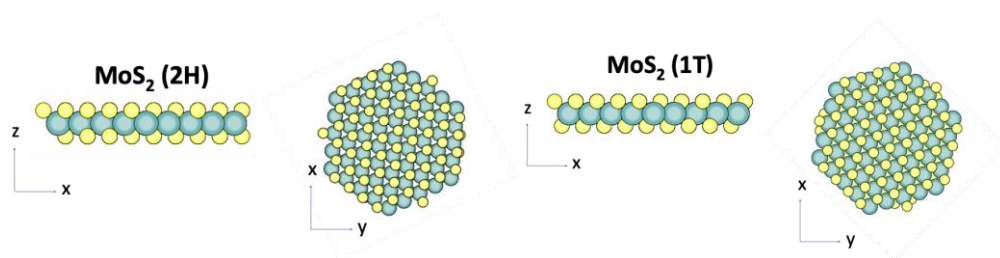
$$I(\vec{k}) \propto (\hat{e} \cdot \vec{k})^2 e^{-2\gamma L} + 2(\hat{e} \cdot \vec{k}) e^{-\gamma L} \sum_j \frac{\hat{e} \cdot \vec{r}_j}{r_j} f_j(\theta_j) W_j e^{-\gamma L_j} \times \cos[kr_j(1 - \cos \theta_j) + \phi_j(\theta_j)]$$

利用 MsSpec Package 來引入使用此模型，我們用來模擬單層二硫化鉬 (MoS₂) 的球面繞射圖案。MsSpec (Multiple Scattering Spectroscopy) 為材料科學中，專門用於模擬光電子繞射和多重散射效應的 Python 套件。程式的部分主要使用 MsSpec 中的 `hemispherical_cluster()` 函數，以半球的排列模型以預測個方向的繞射，並設定電子動能參數於鉬 Mo 的範圍。進行特定方向高能電磁波對單層二硫化鉬 (MoS₂) 的繞射。

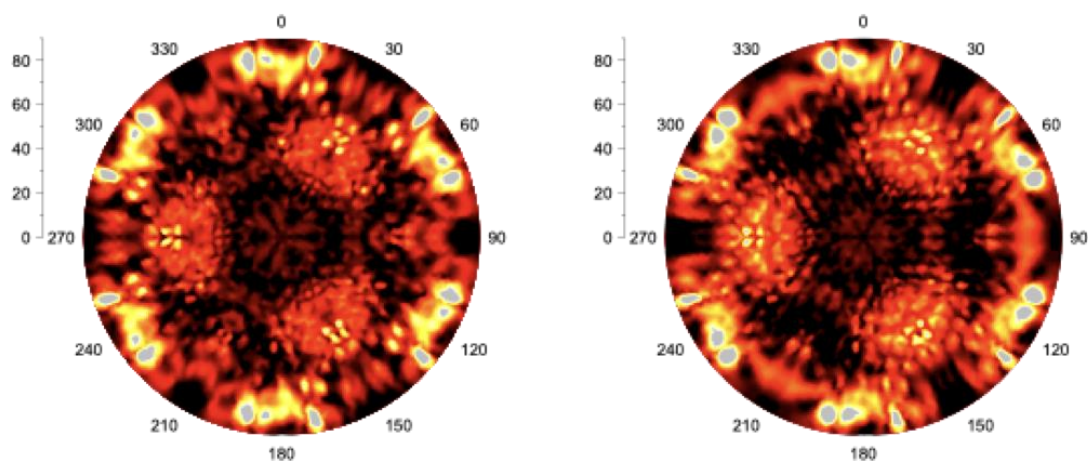


肆、研究結果

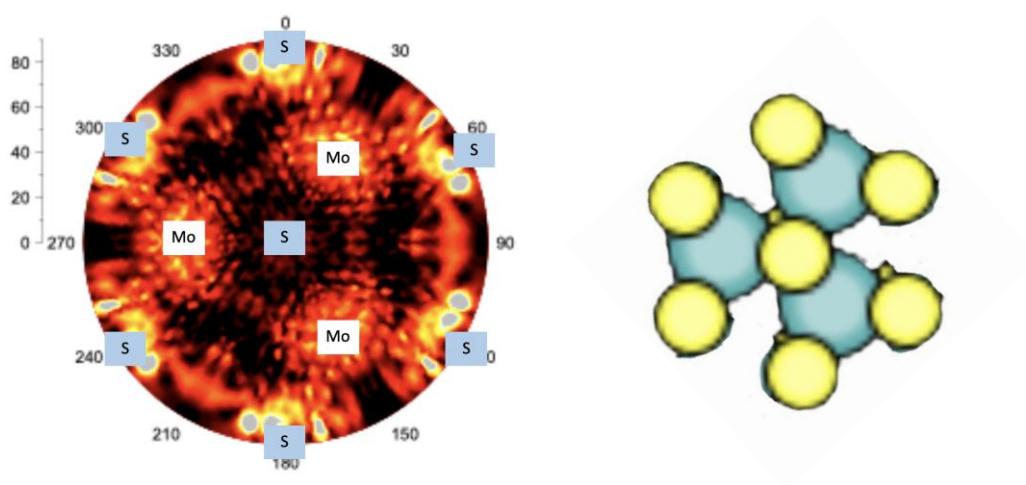
目前已經成功透過 python 得到材料的繞射圖，我們將 PED 模型中的參數帶入 1T 與 2H，嘗試不同晶面所形成的繞射情形。接下來程式的部分我們將等待歐傑電子能譜儀的修復，收集二硫化鉬 (MoS_2) 的能譜資料，確認是否與所產出的能譜相符。



(圖十九) 2H 與 1T 相之晶格模擬



(圖二十) 左圖為 MoS_2 在 2H 相模擬出的繞射圖，右圖則為 1T 相。



(圖二十一) 二硫化鉬繞射圖形對應之元素元素結構

伍、討論

一、AED 與不同材料分析方法(XRD、LEED)之比較

技術	原理	應用範圍	優點	缺點
歐傑電子繞射 (Auger Electron Diffraction)	利用電子束射擊樣品，誘發歐傑電子釋放，測量其能量分佈	樣品表面元素分析、元素深縱分析、元素分布分析	高表面靈敏度、元素定性定量分析能力強	只能分析導體或半導體材料、受限於真空環境
X 光繞射 (X-Ray Diffraction)	利用 X 光與晶格的布拉格繞射現象來解析晶體的結構和相	晶體結構分析、結晶性分析、薄膜殘餘應力分析	可分析多晶與單晶材料、非破壞性分析	無法分析非晶材料
低能電子繞射 (Low-Energy Electron Diffraction)	低能電子射擊樣品表面，測量其經過表面原子排列形成的繞射圖樣	表面結構分析、薄膜成長觀察、表面重構研究	高表面靈敏度、適用於單晶表面研究	設備複雜、需要超高真空環境、實驗成本高

總體而言，AED 與 LEED 用於樣品表面分析，不一樣的是前者用於分析元素組成；後者用於分析單晶原子排列，而 XRD 則是可以用於晶體結構分析。

二、AED 在材料科學中的應用潛力

（一）原位與即時分析技術

以下分為原位反應監測與即時分析：

1. 原位反應監測

透過整合及優化 AED 與反應室，使 AED 能在高溫、高壓、高電場等更極端複雜的環境進行表面分析，例如觀察催化劑表面在實際反應環境中的原子分布變化。

2. 即時分析

透過脈衝電子源捕捉亞毫秒等級的動態變化，可以用於研究表面反應的瞬間狀態，使我們能得知整個反應過程的表面變化。

（二）多技術整合分析

單一技術能得知的資訊較為有限，因此利用其他技術整合 AED 得到更全面的表面資訊勢必會成為未來的趨勢之一。例如利用 AED 與 XPS(X 射線光電子能譜學)可以結合元素組成與化學態分析，提供結構與化學資訊的進一步解讀。

（三）AI 學習與大數據分析

AED 測得的數據包含大量複雜的衍射圖譜與訊號，未來在 AI 的協助下可大幅提升數據解析

的速度與精準度。例如透過訓練模型以快速辨識各種測量出來的能譜圖為何種元素，也可結合 AI 進行資料庫篩選，加速材料的優化以及新材料的發現。

陸、結論

- 一、已完成歐傑電子能譜儀的技術原理與相關理論學習
- 二、成功建立二硫化鋁晶格及其他原分子、晶格模型
- 三、Python 成功模擬電子波動與繞射圖案，為研究提供了理論數據
- 四、因儀器維修，後續應收集實驗數據，並與模擬結果比對，確保 AES 的分析能力
- 五、比對 AES 與其他材料分析技術之優劣

柒、參考文獻資料

【期刊論文】

Auger, P. (1925). Sur les rayons β secondaires produits dans un gaz par des rayons X. *Journal de Physique et le Radium*, 6, 205.

Davisson, C. J., & Germer, L. H. (1927). Reflection of electrons by a crystal of nickel. *Physical Review*, 30, 705.

Einstein, A. (1905). On a heuristic viewpoint concerning the production and transformation of light. *Annalen der Physik*, 17, 132 – 148.

Jönsson, C. (1961). Elektroneninterferenzen an mehreren künstlich hergestellten Feinspalten. *Zeitschrift für Physik*, 161, 454-474.

Mak, K. F., Lee, C., Hone, J., Shan, J., & Heinz, T. F. (2010). Atomically thin MoS₂: A new direct-gap semiconductor. *Physical Review Letters*, 105, 136805.

Seah, S., & Dench, W. A. (1979). Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard database for electron inelastic mean free paths in solids. *Surface and Interface Analysis*, 1, 2.

Splendiani, A., Sun, L., Zhang, Y., Li, T., Kim, J., Chim, C. Y., ... & Wang, F. (2010). Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂. *Nano Letters*, 10, 1271 – 1275.

Liu, C. M., et al. (2020). Computational modeling of crystal structures in materials science. *Journal of Applied Physics*, 128, 041101.

【書籍】

Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston.

Born, M., & Wolf, E. (1999). *Principles of optics* (7th ed.). Cambridge University Press.

Briggs, D., & Seah, M. P. (1990). *Practical surface analysis: Auger and X-ray photoelectron spectroscopy*. Wiley.

Hecht, E. (2001). *Optics* (4th ed.). Addison-Wesley.

Kittel, C. (2004). *Introduction to solid state physics* (8th ed.). Wiley.

【會議論文與報告】

de Broglie, L. (1924). *Recherches sur la théorie des quanta*. Thèse de Doctorat, Université de Paris.

Bragg, W. L. (1913). The diffraction of short electromagnetic waves by a crystal. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 17, 43.

Young, T. (1802). Experiments and calculations relative to physical optics. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 92, 12-48.

【網路資源】

Crystals. (n.d.). *Bravais Lattices*. Introduction to Inorganic Chemistry. Retrieved from <https://chem.libretexts.org/>

MDPI. (2021). *Crystals - Special Issue: Advances in 2D Materials Research*. Retrieved from <https://www.mdpi.com/>

Spectra Research. (n.d.). *Auger Electron Spectroscopy*. Retrieved from <https://www.spectraresearch.com/>

CNRS. (n.d.). *Hemispherical Cluster Analyzer*. Retrieved from <https://msspec.cnrs.fr/>

National Chung Hsing University. (n.d.). *Materials Science Spectroscopy Lab Video*. Retrieved from <https://cdtl.video.nchu.edu.tw/>