

ОБЪЕМНОЕ РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

С.Л. Дударев

Московский инженерно-физический институт
115409, Москва

Поступила в редакцию 22 ноября 1990 г.

Обнаружен новый тип динамического рассеяния быстрого электрона в кристалле, сопровождающийся резонансной локализацией частицы в узкой зоне спектра состояний поперечного движения. Возникновение резонанса объясняет природу кольцевых и параболических дифракционных картин и решает проблему интерпретации изображения в электронной микроскопии высокого разрешения.

1. Сообщение о наблюдении кольцевых и параболических дифракционных картин было сделано Эмсли в начале 1934 года¹. Природа картин, по предположению Эмсли, связана с неупругим захватом электронов состояниями, локализованными вблизи осей или атомных плоскостей кристалла. Результаты недавних экспериментов Пенга с соавторами²⁻⁴ и последующих работ^{5,6} показывают, что возникающие в различных геометриях рассеяния кольца и параболы усиленной интенсивности являются следствием "одномерной" дифракции электронов, локализованных в потенциале отдельной атомной плоскости или оси. Однако теоретического описания явления до настоящего времени получено не было. Ниже найден чисто упругий механизм локализации, объясняющий природу кольцевых и параболических дифракционных картин¹⁻⁶.

2. При углах наклона ϑ вектора импульса электрона \vec{p} к оси кристалла z , близких к $\vartheta_r = \arccos(1 - 2\pi/pa_{\parallel})$, где a_{\parallel} - период вытянутых вдоль z атомных цепочек, существенную роль играет упругое взаимодействие с передачей импульса вдоль оси^{3,4}. Ограничиваясь в фурье-разложении периодического потенциала векторами обратной решетки с нулевой и минимальной ненулевой проекциями на ось, $U(\vec{r}) = U_0(\vec{\rho}) + U_1(\vec{\rho}) \exp(igz) + U_{-1}(\vec{\rho}) \exp(-ijz)$, $g = 2\pi/a_{\parallel}$, найдем волновую функцию (ВФ) задачи рассеяния

$$\Psi_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{r}) = \alpha(z) \exp(i\vec{p}\vec{r}) + \exp(i(p \cos \vartheta + g)z) \sum_j \beta_j(z) b_j(\vec{p}_{\perp} + \vec{\Delta}, \vec{\rho}), \quad (1)$$

где суммирование по j производится по зонам блоковского спектра состояний (БСС) поперечного движения электрона в потенциале $U_0(\vec{\rho})$ с законом дисперсии $E_j(\vec{p}_{\perp})$, α и β_j - плавные функции z , а $\vec{\Delta}$ - вектор поперечного смещения плоскости векторов обратной решетки минус первой лауэ-зоны (ЛЗ) относительно нулевой ЛЗ. Величина амплитуд $\beta_j(z)$ зависит от соотношения между параметром отклонения от массовой поверхности

$$\delta_j(\vec{p}) = E_j(\vec{p}_{\perp} + \vec{\Delta}) + \frac{(p \cos \vartheta + g)^2}{2m} - \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad ? \quad (2)$$

матричным элементом связи каналов $U_1(j) = \int d^2\rho e^{-i\vec{p}_{\perp}\cdot\vec{\rho}} U_1(\vec{\rho}) b_j(\vec{p}_{\perp} + \vec{\Delta}, \vec{\rho})$ и коэффициентом неупругой абсорбции электронов $\mu = n\nu\sigma_{inel}$. Неравенство $|U_1(j)| > \mu$ при нормальных условиях выполняется лишь для состояний из нижней зоны БСС с $j = 0$. Тогда для $j > 0$ имеем $|\beta_j(z)| \ll |U_1(j)|/\mu \ll 1$ и вблизи ϑ_r возникает "двухуровневое" резонансное поведение ВФ с

$$|\beta_0(z)|^2 = 1 - |\alpha(z)|^2 = \frac{1}{1 + Y^2} \sin^2 \left(\frac{m|U_1(0)|}{p} z \sqrt{1 + Y^2} \right), \quad (3)$$

где $Y = \delta_0(\vec{p})/2U_1(0)$. При $\vartheta = \vartheta_0 = \arccos \left(1 - \frac{2\pi}{p a_{\parallel}} - \frac{mE_0(\vec{p}_{\perp} + \vec{\Delta})}{p^2} \right)$ на глубине $z = \pi v/2|U_1(0)|$ электрон локализуется в нижней узкой зоне БСС, что сопровождается его ускорением в направлении оси кристалла и уменьшением энергии движения в плоскости $\vec{p} = (x, y)$. Близкое к (1) - (3) поведение обнаруживает ВФ задачи поверхностного резонансного рассеяния ⁷. По аналогии режим движения (1), (3) можно назвать объемным резонансом (ОР). Угловая ширина резонансной области определяется условием $|Y| < 1$, т.е. $|\vartheta - \vartheta_0| < m|U_1(0)|/g^{1/2}p^{3/2}$ и сильно зависит от температуры

$$|U_1(0)| \sim \exp(-pg \langle u^2 \rangle), \quad (4)$$

где $\sqrt{\langle u^2 \rangle}$ - линейное тепловое смещение. Сравнение (4) с условием неупругого разрушения резонанса $\mu > |U_1(0)|$ показывает, что нулевые колебания атомных ядер ограничивают область существования ОР диапазоном нерелятивистских энергий частиц $E_p = \frac{p^2}{2m} < (mg^2 \langle u^2 \rangle)^{-1} \sim 10^4$ эВ. Именно в этом диапазоне энергий электронов были обнаружены кольцевые и параболические дифракционные картины.

3. Природа наблюдавшихся экспериментально ¹⁻⁶ кольцевых и параболических дифракционных картин связана с возникновением ОР в конечном состоянии $\Psi_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{r})$ задачи неупругого рассеяния электрона с возбуждением внутренних степеней свободы кристалла (фононов, электрон-дырочных пар и т.д.). ВФ конечного состояния $\Psi_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{r})$ связана с (1) соотношением взаимности $\Psi_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{r}) = (\Psi_{-\vec{p}}^{(+)},(\vec{r}))^*$. В случае столкновений с ионизацией атомов в кубических (ГЦК или ОЦК) кристаллах интегральное по энергии сечение рассеяния имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\omega'} \sim 1 - b_0(-\vec{p}'_{\perp} + \vec{\Delta}, 0) \frac{Y'}{1 + Y'^2} + \{|b_0(-\vec{p}'_{\perp} + \vec{\Delta}, 0)|^2 - 1\} \frac{1}{2(1 + Y'^2)}, \quad (5)$$

где $Y' = \delta_0(-\vec{p}')/2U_1(0)$. Параметр Y' для состояний в узкой зоне $E_0(-\vec{p}'_{\perp} + \vec{\Delta}) \approx \text{const}$ постоянен в конусе направлений $\vartheta' = \text{const}$, и распределение (5) описывает кольцо интенсивности с максимумом вблизи $\vartheta'_0 = \arccos \left(1 - \frac{2\pi}{p' a_{\parallel}} - \frac{mE_0(-\vec{p}'_{\perp} + \vec{\Delta})}{p'^2} \right)$ и профилем, изображенным на рисунке. Значение ϑ_0 и профиль интенсивности (5) хорошо согласуются с данными экспериментов ¹⁻⁶. Отметим, что сам факт наблюдения правильных колец усиленной интенсивности вокруг направлений плотной упаковки ¹⁻⁶ непосредственно доказывает существование узкой зоны в БСС поперечного движения электрона в двумерном потенциале цепочек атомов кристалла $U_0(\vec{p})$. В случае, если в блоховском спектре $E_j(\vec{p}_{\perp})$ существует несколько узких зон, то на электронограмме возникает несколько концентрических колец различной интенсивности ^{1,3,4}.

Подобные приведенным выше аргументы показывают, что в определенной геометрии дифракции, когда проходящая через начало координат \vec{p} -пространства сфера Эвальда касается какой-либо системы расположенных на одной прямой узлов обратной решетки, принадлежащих плоскости минус первой ЛЗ, возможна локализация электрона в нижней узкой зоне БСС движения частицы в потенциальном поле атомных плоскостей кристалла. В распределении неупруго рассеянных электронов "плоскостные" ОР проявляются в виде системы парабол с фокусами, обращенными к центру дифракционной картины ²⁻⁵. Матричные элементы $U_1(0)$ для плоскостных ОР меньше соответствующих величин для ОР осевого типа, вследствие чего контраст парабол

всегда слабее контраста колец. Быстрое неупругое разрушение плоскостных ОР с уменьшением энергии электронов ($\mu \sim E_p^{-1/2}$) объясняет отсутствие параболических картин на фотографиях, приведенных в ⁶.

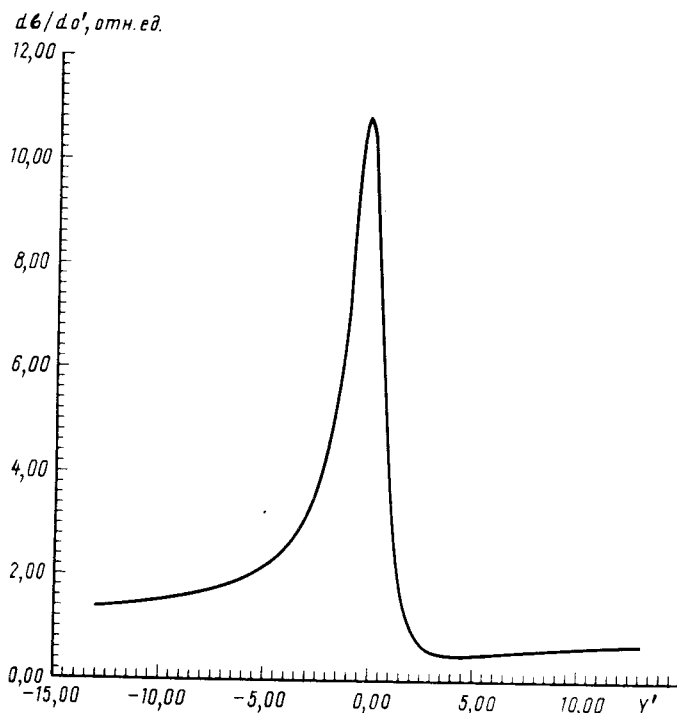


Рис. 1. Профиль интенсивности кольцевой дифракционной картины в "радиальном" направлении, $\phi' = 0$ соответствует направлению $\langle 100 \rangle$ в кристалле Mo, $|b_0(-p'_\perp + \Delta, 0)| = 4,43$, энергия электронов 100 кэВ, расчет спектра $E_j(\vec{p}_\perp)$ выполнен с учетом 29 дифрагированных волн

4. Возможность избирательной локализации электрона в низколежащей узкой зоне БСС в режиме ОР (3) может упростить решение проблемы интерпретации изображений в электронной микроскопии высокого разрешения (НРЕМ) ⁸. В обычных условиях (\vec{p} параллелен z) изображение формируется несколькими зонами БСС и быстро осциллирует с толщиной кристалла. В режиме ОР (3) вся неоднородность волнового поля в поперечном направлении \vec{p} обусловлена единственным низколежащим состоянием БСС, что делает изображение устойчивым и повышает разрешение до масштабов локализации функции $b_0(\vec{p}_\perp + \vec{\Delta}, \vec{p})$ в потенциале отдельной атомной цепочки, т.е. до величины $\lesssim 0,1$ А.

Автор признателен Л.-М.Пенгу за предложенную тему работы и полезные обсуждения, и М.И.Рязанову за интерес к работе и критические замечания.

Литература

1. Emslie A.G. Phys. Rev., 1934, 45, 43.
2. Peng L.-M., Cowley J.M., Yao N. Ultramicroscopy, 1988, 26, 189.
3. Peng L.-M. In: EMAG-MICRO 89, Inst. Phys. Conf. Ser. N 98, Ch. 3, P.95. Inst. Phys.: Bristol - London, 1990.
4. Peng L.-M., Gjønnes J.K. Acta Cryst. A, 1989, 45, 699.

5. Yao N., Cowley J.M. Ultramicroscopy, 1989, 31, 149.
 6. Daimon H., Ino S. Surf. Sci., 1989, 222, 274.
 7. McRae E.G. Rev. Mod. Phys., 1979, 51, 541.
 8. Инденбом В.Л., Точилин С.Б. ЖЭТФ, 1990, 98, 1402.
 9. Kambe K. Ultramicroscopy, 1982, 10, 223.
 10. Chukhovskii F.N., Vergasov V.L. Acta Cryst. A, 1990, 46, 153.
-