

01;10;11;12

©1994

СКОЛЬЗЯЩЕЕ ОТРАЖЕНИЕ ПОЗИТРОНОВ ОТ КОСОГО СРЕЗА КРИСТАЛЛА

Т.А.Боброва, Л.И.Огнев

Усиление интереса к позитронным методам изучения структуры поверхности в последнее время связано прежде всего с интенсивным развитием источников позитронных пучков [1]. В частности, дифракция на отражение позитронов энергией нескольких десятков кэВ высокой степени монохроматичности может быть использована для изучения поверхностей монокристаллов аналогично дифракции электронов высоких энергий на отражение (ДЭВЭО). Подобно ДЭВЭО, метод дифракции позитронов должен обладать высокой чувствительностью к поверхностному разупорядочиванию, кроме того, преимущественное движение позитронов вдали от атомных остовов снижает вероятность некогерентных процессов. В настоящей работе предложен метод численного моделирования отражения позитронного пучка от поверхности монокристалла с учетом некогерентного рассеяния позитронов на тепловых колебаниях решетки.

Движение релятивистской частицы в потенциале $V(z, r)$ может быть описано уравнением типа уравнения Шредингера [2]. Для амплитуды $\psi(z, r)$ волновой функции позитрона $\Psi(z, r) = \psi(z, r) \exp(ik_z z)$, движущегося под малым углом к оси $0z$, так что $k_z \approx |\mathbf{k}|$, это уравнение имеет вид

$$2ik_z \partial \psi / \partial z + \Delta_{\perp} \psi = k_z^2 V'(z, r) \psi(z, r), \quad (1)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор позитрона, $r = (x, y)$ — поперечные координаты, $V'(z, r) = V(z, r) 2\gamma m_0 / (\hbar^2 k_z^2)$, m_0 — масса покоя позитрона, γ — Лоренц-фактор. При выводе (1) предполагалось, что $|\partial^2 \psi / \partial z^2| \ll k_z |\partial \psi / \partial z|$.

Далее будем предполагать, что флуктуации потенциала имеют гауссово распределение и δ коррелированы вдоль направления движения позитрона. Тогда после усреднения (1) по статистике флуктуаций для амплитуды $\langle \psi \rangle$ имеем уравнение Дайсона

$$2ik_z \partial \langle \psi \rangle / \partial z + \Delta_{\perp} \langle \psi \rangle - k_z^2 \langle V'(z, r) \rangle \langle \psi \rangle - ik_z^2 V''(r) \langle \psi \rangle = 0,$$

$$\psi(z=0, r) = \psi_0(r), \quad (2)$$

где $V''(r) = (k_z/4) \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta V'(0, r) \delta V'(z, r) \rangle dz$.

Уравнение (2) описывает когерентную составляющую волновой функции без учета ядерной отдачи. Подробное обсуждение физических аспектов сделанных приближений, а также расчет мнимой части потенциала $V''(r)$ можно найти в работе [3].

Пусть позитрон налетает на монокристалл под малым углом к некоторым кристаллическим плоскостям, параллельным или почти параллельным поверхности, причем направление влета далеко от основных кристаллических осей. Тогда комплексный потенциал $V' + iV''$ может быть усреднен вдоль плоскостей кристалла. При этом зависимость от поперечной координаты y в уравнении (2) исчезает, а его численное решение существенно упрощается.

Численный метод решения уравнения (2) ранее был применен для изучения движения каналированных электронов в монокристаллах [4] и предполагает пошаговый расчет амплитуды $\langle \psi(z, x) \rangle$, исходя из ее начального значения при $z = 0$.

При постановке задачи предполагалось, что пространственно ограниченный пучок позитронов энергией 50 кэВ и угловой расходимостью 0.004 рад падает под скользящим углом на поверхность (110) монокристалла кремния, либо на ступенчатую поверхность, представляющую собой косой срез кристалла относительно плоскостей (110) под углом 0.032 рад. Как показано в работе [3], величина мнимой части потенциала составляет около 1% от его действительной части.

Метод решения уравнения (2) позволяет проследить динамику формирования отраженного и проходящего в кристалл пучков. На рис. 1 представлена зависимость числа N отраженных и прошедших позитронов от расстояния вдоль поверхности кремния, параллельной плоскостям (110). Пунктиром отмечена точка, в которой максимум позитронной плотности достигает первого максимума потенциала. Убывание числа прошедших позитронов на рисунке связано с убыванием когерентной составляющей пучка при рассеянии на тепловых колебаниях атомов. Из анализа спектра волновой функции прошедших позитронов следует, что коэффициент преломления пучка при углах падения больших 0.025 равен $n = 1 - 1.5 \cdot 10^{-4}$. Учитывая, что длина пробега позитронов в кремнии [5] гораздо больше длины экстинкции, можно заключить, что процесс аннигиляции позитронов не будет сказываться на характеристиках отраженного пучка.

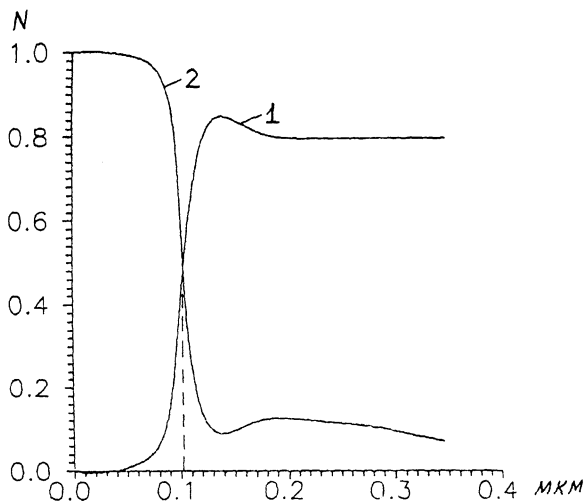


Рис. 1. Зависимость числа отраженных (1) и прошедших (2) позитронов от расстояния вдоль поверхности (110) кристалла кремния. Угол падения пучка равен 0.0225 рад. Пунктиром отмечена точка, в которой максимум позитронной плотности достигает первого максимума потенциала.

Моделирование взаимодействия позитронов со ступенчатой поверхностью проводилось в случаях падения пучка “вверх по ступенькам” и “вниз по ступенькам”. При скольжении пучка “вверх по ступенькам” все позитроны оказываются захваченными в кристалл и отраженный пучок не формируется. Прошедший пучок сохраняет в целом гауссову форму за исключением случаев возникновения дифракции на плоскостях. Используемая схема расчета позволяет наблюдать эволюцию позитронной волны в приповерхностном слое толщиной до 200 межатомных расстояний.

При падении позитронов “вниз по ступенькам” поверхности среза формируется отраженный пучок, причем график зависимости коэффициента отражения от угла падения оказывается сдвинутым в сторону меньших углов на 0.007 рад по сравнению со случаем сингулярной поверхности. На рис. 2 представлен угловой спектр отраженного пучка. Положение основных максимумов спектра соответствует направлениям дифракции позитронов на ступенчатой поверхностной структуре и хорошо описывается с помощью построения Эвальда в обратном пространстве [6]. Отклонение положения пика, соответствующего 0-му порядку дифракции (зеркальному отражению от поверхности) от его точного значения, обусловлено преломлением позитронной волны, выходящей из кристалла через торцы ступенек.

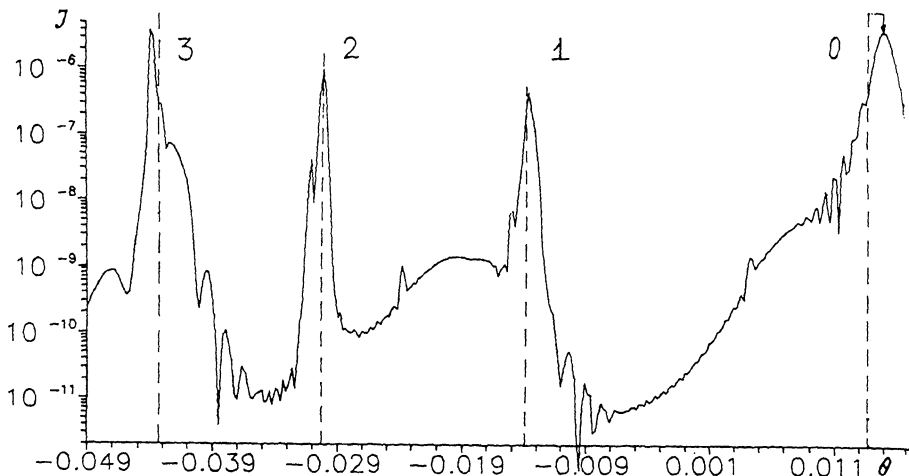


Рис. 2. Угловой спектр отражения позитронов, падающих на ступенчатую поверхность кремния под углом 0.018 рад “вниз по ступенькам” плоскостей. Нулевое значение угла совпадает с направлением вдоль плоскостей (110), составляющих с поверхностью кристалла угол 0.032 рад (длина ступенек $\approx 60 \text{ \AA}$). Пунктиром отмечены точные направления дифрагированных от поверхности пучков 0, 1, 2 и 3-го порядков.

Интенсивность дифракционных пиков зависит от угла падения и находится в качественном согласии с построением Эвальда.

Таким образом, явление возникновения или отсутствия отраженного позитронного пучка в зависимости от направления скольжения по ступенчатому срезу кристалла может быть использовано для практической диагностики структуры поверхностей и заслуживает дальнейшего теоретического и экспериментального изучения. Описанный выше метод может быть применен для моделирования процессов когерентного рассеяния позитронных пучков в приповерхностной области монокристалла с целым рядом структурных нарушений, а также для расчета спектров ДЭВЭО.

Список литературы

- [1] Schulz P.J., Lynn K.G. // Rev. Mod. Phys. 1988. V. 60. N 3. P. 701-779.
- [2] Lervig Ph., Lindhard J., Nielsen V. // Nuclear Physics. 1967. V. A96. N 3. P. 489-504.
- [3] Ognev L.I. // Radiation Effects and Defects in Solids. 1993. V. 25. P. 81-87.

- [4] *Дабатов С.Б., Огнев Л.И.* // ЖТФ. 1988. Т. 58. В. 9. С. 1696–1701.
- [5] *Mourino M., Lobl H., Paulin R.* // Phys. Lett. A. 1979. V. 71. N 1. P. 106–108.
- [6] Пучки заряженных частиц и твердое тело (Итоги науки и техники) / Науч. ред. Мартыненко Ю.В. М., 1990. Т. 3. С. 159.

Российский Научный
Центр “Курчатовский институт”
Москва

Поступило в Редакцию
29 июня 1994 г.

