

УДК 537.533.74

© 1991

## ОБРАЗОВАНИЕ КОЛЬЦЕВЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ПРИ ОБРАТНОМ РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ

С. Л. Дударев

Показано, что при определенных значениях угла наклона вектора импульса электрона к осям атомных цепочек волновая функция частицы обнаруживает резонансное поведение, которое сопровождается захватом электрона в низколежащее блоховское состояние спектра поперечного движения. В угловом распределении квазиупруго обратнорассеянных электронов указанный резонанс приводит к появлению кольцевой аномалии интенсивности вокруг кристаллографического направления плотной упаковки. Обнаружен эффект расщепления резонанса в окрестности точки пересечения кольцевой картины с Кикучи-полосой. Установлены закономерности неупругого разрушения резонанса, связанные, в частности, с тепловыми колебаниями атомов и электронными возбуждениями среды.

Выполненные в последние годы исследования угловых спектров фотоэлектронов [1, 2], Оже-электронов [3] и квазиупруго отраженных частиц [4-7] позволили многим авторам сформулировать вывод о том, что положение максимумов угловых распределений электронов с энергиями  $E \geq \geq 500$  эВ в задачах вторичной эмиссии монокристаллов с высокой точностью соответствует направлениям плотной упаковки, причем эти максимумы формируются в результате фокусировки электронов при их движении под малыми углами к осям атомных цепочек. В частности, в работах [8, 9] указанное соответствие было использовано для определения напряжений в кристалле и мест расположения инородных атомов и молекул на его поверхности. Однако результаты недавних экспериментов Даймона и Ино [10], выполненных ими с использованием анализатора типа «сферическое зеркало» [11], свидетельствуют о нарушении правила совпадения максимумов эмиссии и кристаллографических направлений плотной упаковки. Согласно [10], в геометрии обратного рассеяния электронов помимо обычных максимумов [1-7] возникает аномалия интенсивности, которые имеют вид почти правильных колец вокруг направлений осей цепочек атомов кристалла.

Впервые кольцевые дифракционные картины наблюдал Эмсли в 1934 г. [12] при отражении быстрых электронов под скользящими углами от поверхности мишени. Он предположил, что кольцевые картины возникают вследствие каналирования электронов вдоль осей цепочек атомов кристалла. Позже Синохара [13] выдвинул иное объяснение: кольцо интенсивности является пределом многоугольников, возникающих в результате наложения друг на друга большого числа Кикучи-линий. В недавних работах [14-16] было показано, что первоначальная концепция Эмсли [12] является более адекватной. В частности, с использованием этого подхода в [15, 16] удалось оценить радиус наблюдаемых колец интенсивности. Следует отметить, однако, что в перечисленных выше работах [10, 12-16] их авторы ограничились лишь качественным обсуждением природы кольцевых дифракционных картин, обратив внимание на важную роль теплового диффузного рассеяния в процессе формирования угловых распределений рассеянных электронов. В работах [14, 17] в качестве возможного меха-

низма возникновения состояния канализования электрона была предложена модель поверхностного резонанса. Однако Даймон и Ино [10] справедливо указали на невозможность непосредственного использования этой модели для описания рассеяния электрона на большие углы в геометрии близкого к нормальному падению и вылета частиц из вещества.

Первая попытка теоретического анализа природы возникающих при обратном рассеянии электронов кольцевых дифракционных картин была предпринята в работе [18]. В указанной работе с использованием формализма многоволновой динамической теории дифракции (см., например, [19]) численно рассчитано угловое распределение электронов, квазиупруго обратного рассеянных кристаллом алюминия в окрестности направления  $\langle 111 \rangle$  и построен профиль возникающей вокруг этой оси кольцевой картины. Проведенный в [18] анализ дифракционной задачи показывает, что кольцевая аномалия интенсивности соответствует геометрии упругого рассеяния, в которой одновременно возбуждается большое число дифракционных отражений из минус первой Лауэ зоны (т. е. дифракционных отражений с векторами обратной решетки, имеющими минимальную ненулевую проекцию на направление рассматриваемой оси кристалла [20]). Поскольку многоволновая дифракционная задача содержит большой параметр (число волн  $\gg 1$ ), в ряде случаев она допускает аналитическое исследование (см., например, [21]). Это обстоятельство использовано ниже для построения волновой функции рассеянного в кристалле электрона и расчета углового распределения квазиупруго отраженных частиц. Показано, что кольцевая аномалия интенсивности возникает в определенной геометрии рассеяния как результат резонансного поведения решения многоволновой дифракционной задачи, которое описывает упругий «захват» электрона в блоховское состояние, локализованное вблизи осей цепочек атомов кристалла.

## 1. Упругое рассеяние электронов в условиях многоволнового резонанса

Рассмотрим геометрию рассеяния, в которой интересующее нас кристаллографическое направление плотной упаковки расположено параллельно нормали к поверхности мишени. Пусть ось  $z$  декартовой системы координат направлена в глубь кристалла, причем атомы решетки занимают полупространство  $z \geq 0$ . В соответствии с результатами проведенного в [18] анализа сохраним в Фурье-разложении потенциала кристалла

$$U_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{h}} U_0(\mathbf{G}_{\mathbf{h}}) e^{i\mathbf{G}_{\mathbf{h}}\mathbf{r}} \quad (1)$$

векторы обратной решетки, имеющие нулевую и минимальную ненулевую проекции на ось  $z$ , т. е. напомним

$$U_0(\mathbf{r}) \approx U_0(\rho) + U_1(\rho) e^{igz} + U_{-1}(\rho) e^{-igz}. \quad (2)$$

Величина  $g$  связана с периодом  $a_{\parallel}$  вытянутых вдоль оси  $z$  атомных цепочек соотношением  $g = 2\pi/a_{\parallel}$ . Во избежание недоразумений (см., например, [10]) отметим, что вектор  $g\mathbf{e}_z$  не обязательно принадлежит множеству векторов обратной решетки кристалла  $\{\mathbf{G}_{\mathbf{h}}\}$  и период вытянутых вдоль оси  $z$  атомных цепочек  $a_{\parallel}$  может в несколько раз превышать расстояние между последовательными кристаллографическими плоскостями, параллельными поверхности мишени [20].

С геометрической точки зрения учет зависящих от координаты  $z$  слагаемых в (2) оправдан в том случае, когда импульс электрона  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_{\parallel}, p_z) = (\mathbf{p}_{\parallel}, k)$  лежит в окрестности условия ( $\hbar = 1$ )

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(k + g)^2}{2m}, \quad (3)$$

которое представляет собой условие касания сферы Эвальда плоскости узлов обратной решетки минус первой зоны Лауэ (здесь мы следуем классификации [20]). Вводя угол  $\vartheta$  между направлением  $p$  и осью  $z$ ,  $k=p \cos \vartheta$ , из (3) нетрудно получить

$$\cos \vartheta = 1 - \lambda/\alpha_1, \quad (4)$$

где  $\lambda=2\pi/p$  — длина волны электрона. В работе [10] показано, что соотношение (4) действительно с хорошей точностью описывает геометрию возникающих при обратном рассеянии электронов кольцевых аномалий интенсивности.

Рассмотрим теперь решения стационарного уравнения Шредингера с потенциалом (2)

$$-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \Psi + (U_0(\rho) + U_1(\rho) e^{igz} + U_{-1}(\rho) e^{-igz}) \Psi = E\Psi, \quad (5)$$

соответствующие граничному условию в виде падающей на кристалл плоской волны  $\exp(ipr)$ , где  $E=p^2/2m$ . Поскольку определенная соотношением (4) величина  $\vartheta$  во много раз превосходит угол Линдхарда  $\vartheta_L \sim \sim (|\max U_0(\rho)|/E)^{1/2}$ , первое слагаемое в разложении (2) почти не влияет на характер распространения в веществе падающих частиц и в первом приближении теории возмущений влияние потенциала приводит к появлению компонент волновой функции электрона с проекциями волновых векторов на ось  $z$ , равными  $k+g$  и  $k-g$ . Условие (3) показывает, однако, что в динамическом режиме в окрестности (4) заметную величину может иметь лишь первая из этих компонент, т. е.

$$\Psi(\rho, z) = \Psi_0(\rho, z) e^{ikz} + \Psi_1(\rho, z) e^{i(k+g)z}, \quad (6)$$

где в явном виде выделены медленно изменяющиеся вдоль  $z$  амплитудные множители  $\Psi_0(\rho, z)$  и  $\Psi_1(\rho, z)$ . Использование условия непрерывности волновой функции быстрого электрона на границе кристалла для величин  $\Psi_0(\rho, z)$  и  $\Psi_1(\rho, z)$  дает

$$\begin{aligned} \Psi_0(\rho, 0) &= \exp(ip_\parallel \rho), \\ \Psi_1(\rho, 0) &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Волновая функция  $\Psi_0(\rho, z)$  в пренебрежении вторым и третьим слагаемым суммы (2) описывает эволюцию волнового поля электрона в усредненном вдоль  $z$  и периодическом в плоскости  $\rho(x, y)$  потенциале  $U_0(\rho)$ . Как известно (см., например, [20, 21]), в этом случае  $\Psi_0(\rho, z)$  можно представить в виде суперпозиции блоховских волновых функций задачи поперечного движения

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + U_0(\rho)\right) b_j(\mathbf{p}_\parallel, \rho) = E_j(\mathbf{p}_\parallel) b_j(\mathbf{p}_\parallel, \rho) \quad (8)$$

с медленно меняющимися вдоль  $z$  коэффициентами, причем основной вклад в разложение всегда дают состояния тех зон  $j$ , для которых  $E_j(\mathbf{p}_\parallel) \approx \approx p_\parallel^2/2m$ . Аналогичным образом, представляя  $\Psi_1(\rho, z)$  в виде ряда по блоховским функциям (8), можно прийти к заключению, что заметную роль в этом разложении будут играть лишь те состояния, энергия которых  $E_j$  близка к

$$E_j \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{(k+g)^2}{2m}. \quad (9)$$

При нормальном падении электрона на кристалл ( $\vartheta=0$ ) в правой части (9) стоит большая отрицательная величина и второй компонентой волновой функции (6) можно пренебречь. С увеличением угла падения  $\vartheta$  разность (9) увеличивается, обращаясь в нуль в точке, определенной равенствами (3) и (4). Для того чтобы понять структуру возникающего вблизи (3) ре-

шения уравнения (5), заметим, что энергетический спектр блоховских состояний поперечного движения нерелятивистских электронов  $E_j(\mathbf{q})$  обычно характеризуется наличием одной узкой зоны при  $E_j < 0$  и квазинепрерывным поведением при  $E_j > 0$  [21]. Отсюда можно заключить, что при  $\vartheta \ll \arccos(1 - \lambda/a_{\parallel}^2)$  вклад в разложение  $\Psi_1(\rho, z)$  по системе функций (8) дает лишь состояние из низколежащей зоны  $|j=0\rangle$ ,  $b_0(\mathbf{q}, \rho)$ , локализованное вблизи осей цепочек атомов кристалла. (В общем случае немоноатомного кристалла со сложной элементарной ячейкой в блоховском энергетическом спектре может присутствовать несколько узких зон сильно связанных состояний. В этом случае в разложении  $\Psi_1(\rho, z)$  при  $\vartheta < \arccos(1 - \lambda/a_{\parallel})$  необходимо учесть все эти зоны).

Волновую функцию состояния электрона  $b_0(\mathbf{q}, \rho)$  в низколежащей зоне (8) можно найти с использованием приближения сильной связи [22]

$$b_0(\mathbf{q}, \rho) = \sqrt{S_1} \sum_A e^{i\mathbf{q}\rho_A} \Phi(\rho - \rho_A), \quad (10)$$

где суммирование по  $\rho_A$  проводится по координатам проекций атомных цепочек на плоскость  $(x, y)$ ;  $n_1 = S_1^{-1}$  — число цепочек на единицу площади поверхности кристалла; функция  $\Phi(\rho)$  описывает основное состояние электрона в потенциале отдельной цепочки. Состояние (10) является бездисперсионным и характеризуется величиной энергии связи  $E_0(\mathbf{q}) = E_0 < 0$ . С использованием представления (10) при  $\vartheta < \arccos(1 - \lambda/a_{\parallel})$  волновую функцию (6) можно записать в виде

$$\Psi(\rho, z) = e^{ikz} \sum_j \alpha_j(z) b_j(\mathbf{p}_{\parallel}, \rho) + \beta(z) e^{i(k+g)z} \sqrt{S_1} \sum_A e^{i(\mathbf{p}_{\parallel} + \Delta)\rho_A} \Phi(\rho - \rho_A), \quad (11)$$

где для удобства дальнейших вычислений во второе слагаемое (11) включен фазовый фактор вида  $\exp(i\Delta\rho_A)$ , причем вектор  $\Delta \in (x, y)$  выбран таким образом, чтобы сумма  $g\mathbf{e}_z + \Delta$  совпадала с одним из векторов обратной решетки кристалла. При  $\vartheta > \arccos(1 - \lambda/a_{\parallel})$ , вообще говоря, в разложении  $\Psi_1(\rho, z)$  необходимо учесть состояния с большими, чем  $E_0$ , энергиями поперечного движения. Однако, как будет видно из дальнейшего рассмотрения, вклад этих состояний в наблюдаемую интенсивность потока обратнорассеянных частиц незначителен и при вычислении углового распределения вылетающих из кристалла электронов влиянием указанных состояний с  $E_j > E_0$  можно пренебречь.

Подстановка (11) в (5) позволяет для медленно меняющихся коэффициентов  $\alpha_j(z)$  и  $\beta(z)$  получить систему связанных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} i \frac{k}{m} \frac{\partial}{\partial z} \alpha_j &= (E_j(p_{\parallel}) - \mathbf{p}_{\parallel}^2/2m) \alpha_j + \beta U_1(j), \\ i = \frac{(k+g)}{m} \frac{\partial}{\partial z} \beta &= \left( E_0 + \frac{(k+g)^2}{2m} - \mathbf{p}^2/2m \right) \beta + \sum_j \alpha_j U_1(j), \end{aligned} \quad (12)$$

где обозначено

$$U_1(j) = \frac{\sqrt{S_1}}{S_0} \int_{S_0} d^2\rho \sum_A e^{-i(\mathbf{p}_{\parallel} + \Delta)\rho_A} \Phi(\rho - \rho_A) U_1(\rho) b_j(\mathbf{p}_{\parallel}, \rho) \quad (13)$$

и учтено равенство  $U_{-1}(j) = U_1^*(j)$ . Начальные условия к уравнениям (12) имеют вид

$$\alpha_j(0) = \frac{1}{S_0} \int_{S_0} d^2\rho b_j^*(\mathbf{p}_{\parallel}, \rho) e^{i\mathbf{p}_{\parallel}\rho}, \quad (14)$$

где область интегрирования ограничена площадью  $S_0$  проекции элементарной ячейки кристалла на плоскость  $(x, y)$ , а  $\beta(0) = 0$ .

После того как решение системы уравнений (12) найдено (отметим, что в (12) помимо упругого рассеяния необходимо учесть эффективное поглощение электронов; см. ниже), для вычисления углового распределения частиц, квазиупруго обратного рассеянных кристаллом при низких температурах, достаточно воспользоваться соотношением [23]

$$I(\vartheta_1; \varphi_1) = N \sum_{\alpha} \frac{d\sigma_{\alpha}(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}_1)}{d\omega} \int_0^{\infty} dz P_{\alpha}(z, \mathbf{p}_0) P_{\alpha}(z, -\mathbf{p}_1), \quad (15)$$

где  $N$  — число элементарных ячеек кристалла в единице объема; суммирование по  $\alpha$  производится по атомам в пределах одной элементарной ячейки;  $d\sigma_{\alpha}(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}_1)/d\omega$  — дифференциальное атомное сечение рассеяния;  $P_{\alpha}(z, \mathbf{p})$  — плотность вероятности обнаружить падающий на кристалл с импульсом  $\mathbf{p}$  электрон на глубине  $z$  в узле  $\alpha$  элементарной ячейки.

## 2. Квазиупругое обратное рассеяние электронов в условиях многоволнового резонанса

В соответствии с формулой (11), для того чтобы рассчитать плотность электронов на узлах решетки  $P_{\alpha}(z, \mathbf{p}) = |\Psi(\mathbf{R}_{\alpha})|^2$ , необходимо найти решение системы уравнений (12) с граничными условиями (14). Учтем, что для быстрых частиц выполняется неравенство  $g/k \ll 1$ , которое позволяет записать (12) в виде

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \alpha_j &= \omega_j \alpha_j + U_1^*(j) \beta, \\ i \frac{\partial}{\partial t} \beta &= \Omega \beta + \sum_j U_1(j) \alpha_j, \end{aligned} \quad (16)$$

где обозначено  $t = mz/k$ ,  $\omega_j = E_j(p_{\parallel}) - P_{\parallel}^2/2m$ ,  $\Omega = E_0 + (k+g)^2/2m - \mathbf{p}^2/2m$ . Проще всего решение (16) выглядит в том случае, когда влиянием потенциала  $U_0(\rho)$  на первую из компонент волновой функции (6) можно пренебречь. При этом (11) содержит всего два неопределенных коэффициента  $\alpha(z)$  и  $\beta(z)$

$$\Psi(\mathbf{p}, z) = \alpha(z) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \beta(z) e^{i(k+g)z} \sqrt{S_1} \sum_A e^{i(\mathbf{p}_{\parallel} + A)\rho_A} \Phi(\rho - \rho_A), \quad (17)$$

которые удовлетворяют системе двух дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \alpha &= U^* \beta, \\ i \frac{\partial}{\partial t} \beta &= \Omega \beta + U \alpha \end{aligned} \quad (18)$$

с начальными условиями  $\alpha(0) = 1$ ,  $\beta(0) = 0$ . Решение задачи (18) имеет резонансный характер

$$\begin{aligned} \alpha(z) &= e^{-i \frac{\Omega}{2} t} \left[ \cos(\sqrt{|U|^2 + \Omega^2/4} t) + \frac{i\Omega}{\sqrt{4|U|^2 + \Omega^2}} \sin(\sqrt{|U|^2 + \Omega^2/4} t) \right], \\ \beta(z) &= \frac{2iU}{\sqrt{4|U|^2 + \Omega^2}} e^{-i \frac{\Omega}{2} t} \sin\left(\sqrt{|U|^2 + \frac{\Omega^2}{4}} t\right) \end{aligned} \quad (19)$$

и описывает периодическую перестройку плоской волны  $\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})$  в блоховское состояние (10), локализованное вблизи осей атомных цепочек. Поскольку состояние (10) является суперпозицией большого числа плоских волн и в рамках динамической теории дифракции может быть описано как совокупность десятков дифракционных отражений, режим движения электрона (17) — (19) можно назвать многоволновым дифракцион-

ным резонансом. Физическая природа резонанса (19) состоит в ускорении частицы вдоль осей атомных цепочек с одновременным резким уменьшением энергии ее поперечного движения в плоскости  $(x, y)$ . Отметим аналогию (19) с явлением поверхностного резонанса [17, 24, 25]: в условиях поверхностного резонанса, так же как и в режиме (19), происходит упругий «захват» электрона в состоянии, локализованные вблизи поверхности кристалла. С другой стороны, возникновение поверхностного резонанса связано с передачей кристаллу импульса, кратного одному из векторов обратной решетки [25], в то время как решение (19) имеет существенно многоволновую природу.

Для вычисления углового распределения обратнорассеянных электронов теперь достаточно подставить квадрат модуля волновой функции (17) в (15) и учесть эффективное поглощение, связанное с электронными возбуждениями среды. Влияние указанных возбуждений при низких температурах, когда некогерентное рассеяние на тепловых колебаниях атомов не играет существенной роли, сводится к умножению квадрата модуля волновой функции на экспоненциальный фактор  $\exp(-\gamma t)$ , где величина  $\gamma$  связана с длиной свободного пробега электронов в веществе соотношением  $l_{\text{св}} = p / m\gamma$ . Интересуясь, как обычно, дифракцией лишь квазиупруго рассеянных частиц [18], для углового распределения вылетающих из кристалла в полупространство  $z < 0$  электронов из (15) нетрудно получить выражение

$$I(\vartheta_1; \varphi_1) = \frac{np}{2m\gamma} \frac{d\sigma}{d\Omega_1} F(\vartheta_1; \varphi_1) = I_{\text{rand}}(\vartheta_1; \varphi_1) F(\vartheta_1; \varphi_1), \quad (20)$$

$$F(\vartheta_1; \varphi_1) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{(Y-D)^2}{1+Y^2} + \frac{A^2}{1+A^2+Y^2} \left( 1 - \frac{(Y-D)^2}{1+Y^2} \right) \right\}, \quad (21)$$

где учтены справедливые для кубического (ОЦК или ГЦК) кристалла равенства  $U = U^*$  и  $\exp(igz_a + i\Delta p_a) = 1$  и использованы обозначения

$$Y = \frac{1}{2U} \left[ E_0 + \frac{(-k_1 + \varepsilon)^2}{2m} - \frac{P_1^2}{2m} \right],$$

$$A = \gamma/U, \quad D = \sqrt{S_1} \Phi(0).$$

Последний из введенных параметров  $D$  имеет наглядный смысл: он пропорционален амплитуде локализации электронов на узлах решетки кристалла в низколежащем блоховском состоянии (10) по сравнению с падающей на кристалл плоской волной. Например, для вытянутых вдоль оси  $\langle 100 \rangle$  кристалла молибдена атомных цепочек численное построение блоховских состояний (8) дает  $D = 4.42$ . Графики функции  $F(Y)$  из (21) для различных соотношений между матричным элементом связи каналов  $U$  (для направления  $\langle 100 \rangle$  кристалла Mo величина  $U$  равна приблизительно  $\approx -2$  эВ) и коэффициентом неупругого поглощения  $\gamma$  приведены на рис. 1. Характер поведения изображенных на рис. 1 зависимостей можно понять из анализа формулы (21). При  $A = 0$  функция  $F(Y)$  имеет максимум в точке  $Y_{\text{max}} = -1/D$ , который с ростом  $A$  смещается в сторону меньших  $Y$  (т. е. меньших значений угла вылета  $\vartheta$ ) по закону  $Y_{\text{max}} \approx -(1+A^2)/D$ . Интенсивность в максимуме при этом падает

$$F(Y_{\text{max}}) \approx 1 + \frac{D^2}{2(1+A^2)}. \quad (22)$$

Значение  $Y_{\text{max}} = -1/D$  соответствует углу вылета электронов

$$\vartheta_1 = \arccos \left( 1 + \frac{|E_0|}{2E} + \frac{|U|}{DE} - \lambda/a_{\parallel} \right). \quad (23)$$

Поскольку выражение (23) не содержит зависимости от азимутального угла  $\varphi_1$ , формула (21) описывает распределение квазиупруго отраженных электронов с кольцевой особенностью на плавном фоне  $I_{\text{rand}}(\vartheta_1; \varphi_1)$ . Отме-

тим, что выражение, с точностью до третьего слагаемого в скобках совпадающее с (23), впервые получил Пенг (см. соотношения (2) из [15] и (2), (8) из [16]). Отсутствующее в [15, 16] слагаемое является результатом динамических эффектов рассеяния и описывает обычный сдвиг резонанса, возникающий вследствие взаимодействия электрона в связанном состоянии (10) с состояниями непрерывного спектра (8)  $b_j(p_{\parallel}, p)$ ,  $j > 0$  [26]. Угловую ширину кольца интенсивности можно найти из условия  $|\Delta Y| \sim \sim 1$ , что дает

$$\Delta \vartheta \sim \frac{m |U|}{\sqrt{g} p^{3/2}}. \quad (24)$$

Соотношение (24), в частности, показывает, что измерение угловой ширины кольцевой особенности в угловом распределении обратнорассеянных

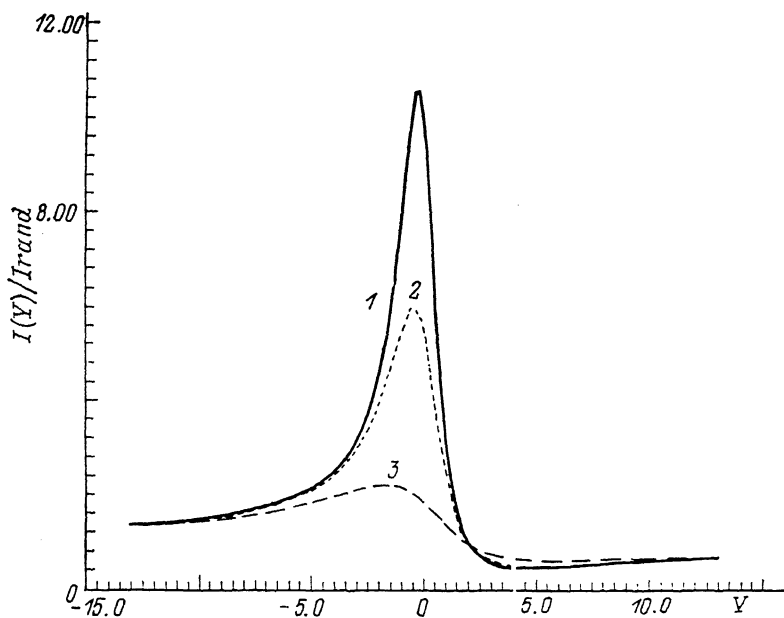


Рис. 1. Угловое распределение обратно рассеянных электронов, расчет по формуле (21).  $A=0.1$  (1), 1.0 (2), 3.0 (3).

(или прошедших через кристалл [27]) электронов в «радиальном» направлении позволяет непосредственно оценить порядок величины матричного элемента резонансной связи состояний  $U_1(j)$  из (13). Отметим также, что закон (24)  $\Delta \vartheta \sim E^{-3/4}$  отличается от обычной энергетической зависимости угловой ширины видимых на электронограмме полос и линий Кикучи  $\Delta \vartheta \sim E^{-1/2}$  [20].

Проведенный выше анализ решений системы уравнений (16) соответствует геометрии дифракции, в которой влиянием потенциала  $U_0(\rho)$  на первую компоненту волновой функции (6) можно пренебречь. На приведенных в [10, 14, 15, 27] фотографиях указанному условию удовлетворяют сегменты кольцевых картин, лежащие вдали от пересечений с полосами Кикучи, возникающими, как известно, в результате брэгговской дифракции неупруго рассеянных электронов [20]. В окрестности точек пересечения Кикучи-полос и кольцевых картин необходимо учесть дифракцию на потенциале  $U_0(\rho)$  падающих электронов, т. е. в первом слагаемом волновой функции (11) выполнить разложение в ряд по блоховским состояниям  $b_j(p_{\parallel}, \rho)$ .

### 3. Пересечение кольцевой дифракционной картины с полосой Кикучи

Как известно, волновую функцию быстрого электрона в кристалле в условиях брэгговской дифракции в ряде случаев можно найти с использованием двухволнового приближения динамической теории, т. е. учитывая в разложении (11) лишь два состояния [20, с. 285]

$$b_1(\mathbf{p}_{\parallel}, \rho) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}} e^{i\mathbf{p}_{\parallel}\rho} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}} e^{i(\mathbf{p}_{\parallel}+\mathbf{G})\rho},$$

$$b_2(\mathbf{p}_{\parallel}, \rho) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}} e^{i\mathbf{p}_{\parallel}\rho} - \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}} e^{i(\mathbf{p}_{\parallel}+\mathbf{G})\rho}, \quad (25)$$

для построения которых в потенциале  $U_0(\rho)$  достаточно сохранить лишь две его Фурье-компоненты (1)

$$U_0(\rho) \cong 2\Lambda \cos(\mathbf{G}\rho), \quad \Lambda < 0, \quad (26)$$

где  $y = \{(\mathbf{p}_{\parallel} + \mathbf{G})^2 - \mathbf{p}_{\parallel}^2\} / 4m\Lambda$  (здесь  $\mathbf{p}_{\parallel}$  обозначает взятую с обратным знаком проекцию импульса вылетающих частиц  $\mathbf{p}_1$  на плоскость  $(x, y)$ ). Соответствующие состояния (25) частоты  $\omega_j$  из (16) равны

$$\omega_1 = \Lambda(y + \sqrt{1+y^2}), \quad \omega_2 = \Lambda(y - \sqrt{1+y^2}). \quad (27)$$

Прежде чем приступить к решению уравнений (16), заметим, что величина  $|\Lambda|$  из (26) для первых сильных отражений имеет величину порядка 10 эВ, в результате чего разность  $|\omega_1 - \omega_2| = 2|\Lambda| \sqrt{1+y^2}$  во всей области изменения параметра  $y$  во много раз превосходит величину матричного элемента связи каналов

$$2|\Lambda| \sqrt{1+y^2} \gg |U_1(j)|. \quad (28)$$

Последнее неравенство показывает, что решение системы трех связанных уравнений (16) для коэффициентов  $\alpha_1(z)$ ,  $\alpha_2(z)$  и  $\beta(z)$  на самом деле представляет собой совокупность двух неперекрывающихся резонансов: одного при  $\Omega \approx \omega_1$  и другого при  $\Omega \approx \omega_2$ . Например, при  $|\Omega - \omega_1| \ll |\omega_1 - \omega_2|$  из (16) получим

$$\alpha_1(t) = \alpha_1(0) e^{-\frac{i}{2}(\Omega + \omega_1)t} \left\{ \cos \sqrt{|U_1(1)|^2 + \left(\frac{\Omega - \omega_1}{2}\right)^2} t + \right.$$

$$\left. + i \frac{\Omega - \omega_1}{\sqrt{|U_1(1)|^2 + \left(\frac{\Omega - \omega_1}{2}\right)^2}} \sin \left( \sqrt{|U_1(1)|^2 + \left(\frac{\Omega - \omega_1}{2}\right)^2} t \right) \right\},$$

$$\alpha_2(t) = \alpha_2(0) e^{-i\omega_2 t},$$

$$\beta(t) = -\frac{2i\alpha_1(0) U_1(1)}{\sqrt{|U_1(1)|^2 + \left(\frac{\Omega - \omega_1}{2}\right)^2}} e^{-\frac{i}{2}(\Omega + \omega_1)t} \times$$

$$\times \sin \left( \sqrt{|U_1(1)|^2 + \left(\frac{\Omega - \omega_1}{2}\right)^2} t \right). \quad (29)$$

Решение (16) при  $|\omega_2 - \Omega| \ll |\omega_1 - \omega_2|$  совпадает с (29) с точностью до замены в нем индексов блоховских состояний  $j=1$ , на  $j=2$ , и наоборот. Интересно отметить, что в соотношениях (29) зависящими от направления импульса  $\mathbf{p}_{\parallel}$  оказываются матричные элементы связи каналов

$$U_1(1, 2) \cong \frac{U}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{1 \mp \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}} \pm \sqrt{1 \pm \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}} \right), \quad (30)$$

причем верхний знак относится к состоянию с  $j=1$ , а нижний — к  $j=2$ .



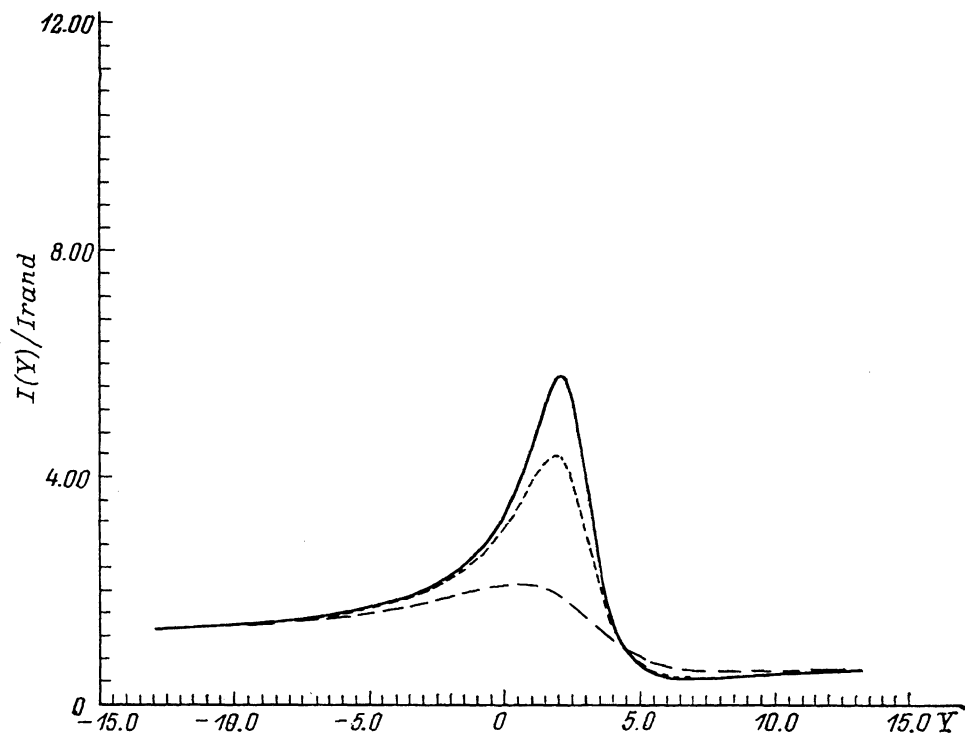


Рис. 2. Угловое распределение обратнорассеянных электронов при учете двухволновой дифракции частиц в Лауэ-зоне нулевого порядка.

Импульс  $p_{\parallel}$  удовлетворяет условию Брэгга,  $y=0$ . Значения  $A$  совпадают с использованными в рис. 1.

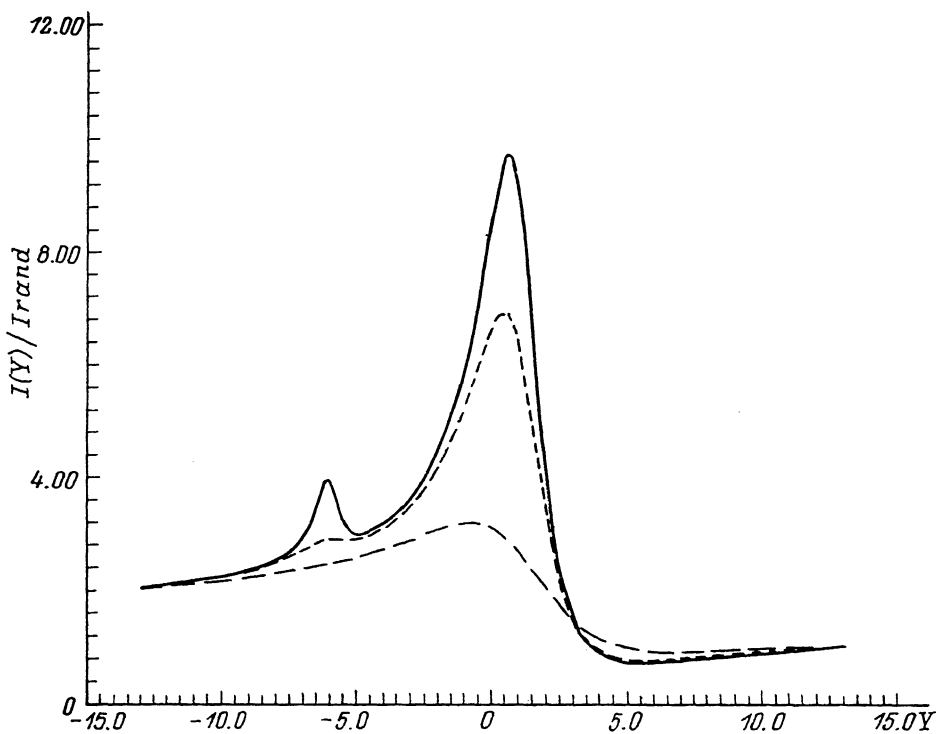


Рис. 3. Распределение интенсивности в кольцевой картине во внутренней области полосы Кикучи,  $y=-1.0$ .

Значения  $A$  совпадают с использованными в рис. 1.

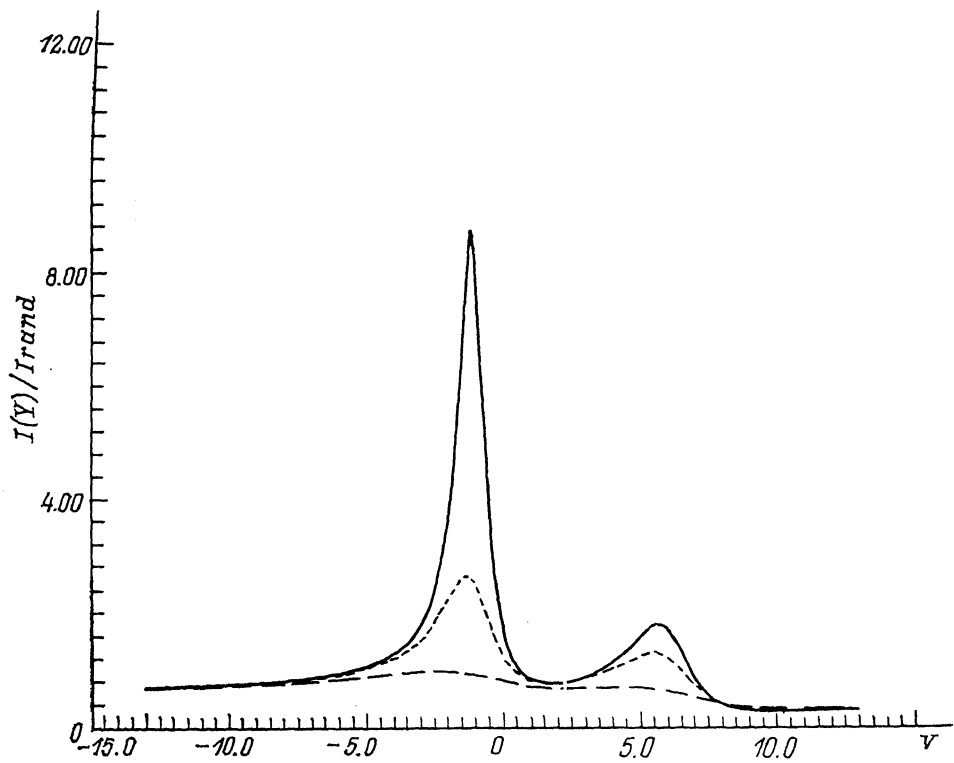
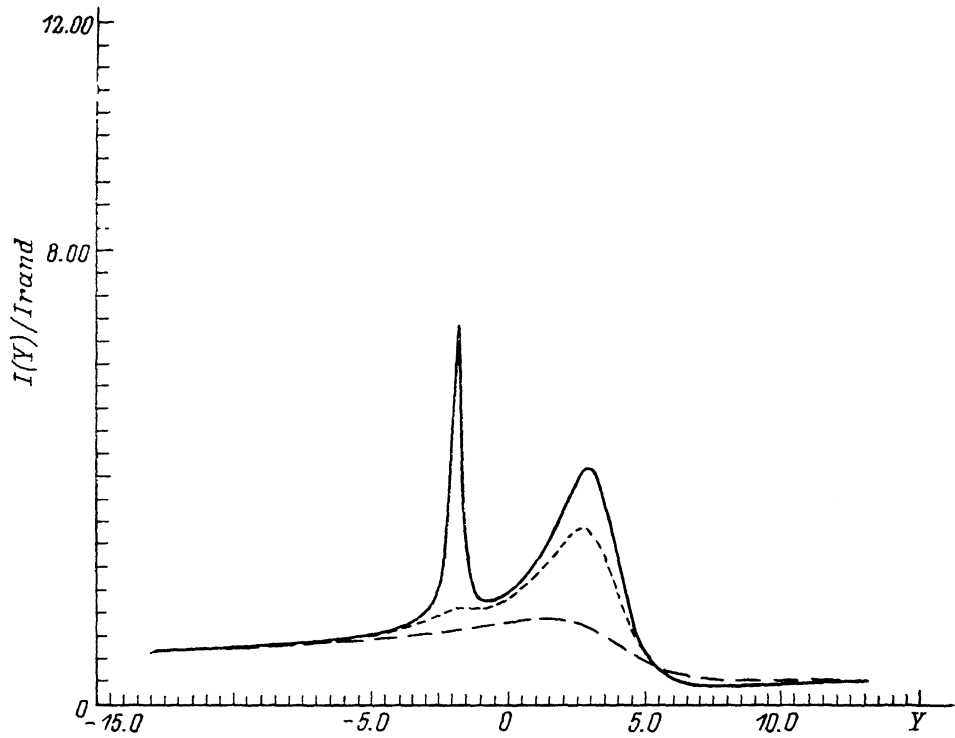


Рис. 4. Распределение интенсивности в кольцевой картине во внешней области полосы Кикучи.  $\gamma=0.3$  (а), 1.0 (б).

Как известно, параметр  $y$  задает отклонение импульса  $p_1$  рассеянного электрона от точного условия Брэгга  $(p_1 + G)^2 = p_1^2$ , причем  $y > 0$  вне полосы Кикучи и  $y < 0$  внутри этой полосы. Из (30) видно, что величина матричного элемента  $U_1(j)$  для состояния с  $j=1$  во всей области изменения  $y$  превышает соответствующую величину для  $j=2$ , причем в точке  $y=0$

$$U_1(2) = 0, \quad U_1(1) = \sqrt{2} U. \quad (31)$$

Подстановка (29) в (15) в этой точке дает для углового распределения обратнорассеянных электронов выражение вида (20), в котором при  $A=0$

$$F(Y) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{(Y - D - W)^2}{2 + (Y - W)^2} \right\}, \quad (32)$$

где  $W = \Lambda/2U$ . Максимум функции (32) соответствует  $Y_{\max} = W - (2D)$ , т. е. смещению точки (23) в область больших углов

$$\vartheta_1 = \arccos \left( 1 + \frac{|E_0|}{2E} + \frac{|U|}{2ED} - \frac{|\Lambda|}{2E} - \frac{\lambda}{a_1} \right). \quad (33)$$

Расчитанные при  $y=0$  для различных значений  $A$  зависимости интенсивности обратного рассеяния от параметра  $Y$  приведены на рис. 2. Помимо уже отмеченного смещения резонанса в область  $Y > 0$  обращает на себя внимание небольшое уширение максимума, связанное с большей, чем на рис. 1, величиной матричного элемента  $U_1(1)$  из (31).

При отклонении направления наблюдения от точного условия Брэгга  $y=0$  вклад в (20) дают оба состояния (25). В результате на зависимости интенсивности квазиупругого обратного рассеяния от «радиальной» переменной  $Y$  (рис. 3, 4) возникают два резонансных максимума, причем правый из них соответствует  $j=1$ , а левый  $j=2$ . Угловая ширина левого максимума меньше угловой ширины правого, что связано с обсуждавшимся выше соотношением между величинами матричных элементов  $U_1(1)$  и  $U_1(2)$  из (30) в области  $|y| \sim 1$ . Отметим также эффект относительно быстрого разрушения резонанса с  $j=2$  с ростом сечения неупругих процессов  $\sim \gamma$ , что связано с малостью величины матричного элемента  $U_1(2)$  в окрестности точного условия Брэгга  $y=0$ .

Таким образом, в окрестности пересечения кольцевой картины с полосой Кикучи имеют место увеличение радиуса кольца в области  $y < 0$  (на фотографии [10, 14, 27] этому соответствует внутренняя область полосы) и уменьшение указанного радиуса при  $y > 0$ , т. е. вне полосы. Для электронов высоких энергий, которым соответствуют относительно малые величины сечений неупругих процессов ( $\gamma \sim E^{-1/2}$ ), можно также ожидать расщепления кольца на две или несколько компонент в зависимости от числа блоховских состояний, дающих вклад в разложение первого слагаемого волновой функции (11).

#### 4. Заключительные замечания

Проведенный выше анализ позволяет сделать вывод, что появление кольцевых дифракционных картин в угловом распределении обратнорассеянных частиц связано с возникновением в определенной геометрии рассеяния особого типа движения электронов (режима многоволнового резонанса), который сопровождается захватом частиц в локализованное вблизи осей атомных цепочек блоховское состояние поперечного движения [10]. Как уже отмечалось выше, определенную величину имеет также вероятность захвата электрона в другие, отличные от (10), зоны блоховского спектра. Оценим вклад состояний, принадлежащих этим зонам, в сечение обратного рассеяния (15).

Говоря о вкладе блоховских состояний других зон  $j \neq 0$  в разложение второго слагаемого волновой функции (6), необходимо обратить внимание на качественное отличие структуры волновых функций этих состояний

от волновой функции (10). Как известно [21], высоколежащие зоны блоховского спектра (8) с  $j=1, 2, 3, \dots$  в нерелятивистской области энергий электронов соответствуют состояниям так называемого надбарьерного типа, локализованным в межатомных пространствах и описываемым квазиклассическое «зависание» электрона над максимумами внутрикристаллического потенциала при поперечном движении [28]. Таким состояниям, с одной стороны, соответствуют малые величины матричных элементов вида (13), что ведет к быстрому неупругому разрушению резонансов. С другой стороны, надбарьерные состояния дают очень незначительный по сравнению с (10) вклад в плотность частиц на узлах решетки кристалла  $P_\alpha(z)$ , что позволяет пренебречь состояниями указанного типа при вычислении сечения обратного рассеяния электронов (15).

Рассмотрим теперь температурную зависимость контраста кольцевых картин. До настоящего времени на такую зависимость обратили внимание только авторы работы [27] при анализе результатов экспериментальных наблюдений угловых распределений быстрых электронов, рассеянных в тонких кристаллах в геометрии «на прохождение». В рамках развитого выше подхода влияние температуры на резонанс (19) главным образом сводится к замене потенциала  $U_1(\rho)$  на его усредненное по тепловым колебаниям значение и к соответствующему резкому уменьшению величины всех матричных элементов связи каналов (13) (это уменьшение пропорционально фактору Дебая—Уоллера с передачей импульса  $\Delta p \sim \sqrt{2gp}$ ). Следствием такой перенормировки параметров задачи (16) является, очевидно, быстрое разрушение резонанса неупругим рассеянием. Вывод об исчезновении резонансного поведения функции (11) при высоких  $T$  подтверждается, в частности, результатами экспериментальных наблюдений [27], которые демонстрируют исчезновение кольцевых картин с повышением температуры кристалла.

В заключение отметим, что теоретический анализ природы кольцевых дифракционных картин при обратном рассеянии электронов в настоящей работе выполнен с использованием методов многоволновой динамической теории, справедливых в области относительно высоких энергий частиц  $E \geq 2$  кэВ [23]. При малых энергиях электронов большую точность при построении волновой функции обеспечивают иные методы, например разложение решения уравнения Шредингера в ряд по атомным  $\mathcal{S}$ -матрицам [27]. Появление кольцевых дифракционных картин в рамках указанных теоретических представлений может быть связано с обсуждавшимися в работе [29] максимумами конструктивной интерференции первого порядка (при рассеянии электрона на цепочке атомов максимум конструктивной интерференции нулевого порядка соответствует углу  $\vartheta=0$ , т. е. направлению «вперед»). В частности, исходя из этих представлений, можно утверждать, что кольцевые дифракционные картины возникают не только в распределениях обратнорассеянных частиц [10], но и в угловых спектрах вылетающих из кристалла оже- и фотоэлектронов достаточно высоких энергий  $E \geq 1000$  эВ.

#### Список литературы

- [1] Egelhoff W. F., Jr. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 5. P. 559—562.
- [2] Xu M.-L., Barton J. J., Van Hove M. A. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 12. P. 8275—8283.
- [3] Cronacher H., Heinz K., Müller K., Xu M.-L., Van Hove M. A. // Surf. Sci. 1989. V. 209. N 3. P. 387—400.
- [4] Гомоюнова М. В., Заславский С. Л., Пронин И. И. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 2. С. 390—395.
- [5] Артемьев В. П., Макаров В. В., Петров Н. Н. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 11. С. 3441—3444.
- [6] Gomyunova M. V., Pronin I. I., Shmulevitch I. A. // Surf. Sci. 1984. V. 139. N 2/3. P. 443—452.
- [7] Chambers S. A., Vitomirov I. M., Weaver J. H. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 6. P. 3007—3014.
- [8] Chambers S. A., Vitomirov I. M., Anderson S. B., Chen H. W. et al. // Superlatt. & Superstruct. 1987. V. 3. N 5. P. 563—571.

- [9] Fadley C. S. // *Physica Scripta*. 1987. V. T17. N 1. P. 39—49.
- [10] Daimon H., Ino S. // *Surf. Sci.* 1989. V. 222. N 1/2. P. 274—282.
- [11] Daimon H., Ino S. // *Rev. Sci. Instrum.* 1990. V. 61. N 1. P. 57—60.
- [12] Emslie A. G. // *Phys. Rev.* 1934. V. 45. N 1. P. 43—46.
- [13] Shinohara K. // *Phys. Rev.* 1935. V. 47. N 10. P. 730—735.
- [14] Peng L.-M., Cowley J. M., Yao N. // *Ultramicroscopy*. 1988. V. 26. N 1. P. 189—194.
- [15] Peng L.-M. // *EMAG-MICRO 89*. Inst. Phys. Conf. Ser. N 98. Chapt. 3 / Eds. P. J. Goodhew & H. Y. Elder. Inst. Phys., Bristol—London, 1990. P. 95—98.
- [16] Peng L.-M., Gjønnnes J. // *Acta Cryst. A*. 1989. V. A45. N 10. P. 699—703.
- [17] Peng L.-M., Cowley J. M. // *Ultramicroscopy*. 1988. V. 26. N 1/2. P. 161—168.
- [18] Dudarev S. L., Peng L.-M. // *Surf. Sci.* 1991. V. 244. N. 3. P. L133—136.
- [19] Gomoynova M. V., Dudarev S. L., Pronin I. I. // *Surf. Sci.* 1990. V. 235. N 2/3. P. 156—168.
- [20] Reimer L. *Transmission Electron Microscopy*. Berlin: Springer, 1984. P. 270.
- [21] Chukhovskii F. N., Vergasov V. L. // *Acta Cryst. A*. 1990. V. A46. N 3. P. 153—165.
- [22] Ашкрофт Н., Мермин Н. *Физика твердого тела*. М.: Мир, 1979. Т. 1. Гл. 10. С. 183.
- [23] Дударев С. Л., Рязанов М. И. // *Поверхность*. 1990. № 7. С. 43—55.
- [24] Miyake S., Hayakawa K. // *Acta Cryst. A*. 1970. V. A26. N 1. P. 60—70.
- [25] Ichimiya A., Kambe K., Lehmpfuhl G. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1980. V. 49. N 2. P. 684—688.
- [26] Мотт Н., Месси Г. *Теория атомных столкновений*. М.: Мир, 1969. Гл. 13. § 4. С. 331.
- [27] Yao N., Cowley J. M. // *Ultramicroscopy*. 1989. V. 31. N 1. P. 149—157.
- [28] Каган Ю., Бабаханян Э. А., Кононец Ю. В. // *Письма в ЖЭТФ*. 1980. Т. 31. № 12. С. 776—780.
- [29] Egelhoff W. F., Jr. // *J. Vac. Sci. Technol. A*. 1988. V. A6. N 3. P. 730—734.

Московский  
инженерно-физический институт

Поступило в Редакцию  
19 ноября 1990 г.