

05;10;11;12

Дифракция медленных электронов на гофрированной поверхности

© С.А. Князев, В.Е. Корсуков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 28 ноября 1997 г.

Рассмотрена кинематическая модель рассеяния электронов малых энергий на одномерной периодической зубчатой структуре, моделирующей гофрированную поверхность. Расчеты профилей интенсивностей дифракционных максимумов выполнены для периодических систем из одинаковых зубцов симметричной треугольной формы с варьируемым числом атомов на каждой из образующих зубца и углом наклона образующих к горизонтали. Основной эффект, возникающий при рассеянии на периодической зубчатой структуре, состоит в уширении или расщеплении дифракционных максимумов по сравнению с картинами дифракции от гладкой цепочки атомов.

При исследовании методом дифракции медленных электронов (ДМЭ) трансформации структуры поверхности Ge(111) и слюды в процессе растяжения и изгиба кристаллов нами обнаружено квазиобратимое с нагрузкой уширение и расщепление рефлексов на картинах дифракции [1,2]. Методами дифракции быстрых электронов и сканирующей туннельной микроскопии [1,3] было показано, что под влиянием деформации монокристаллическая поверхность переходит из моно- в поли- и нанокристаллическое состояние. При этом рельеф поверхности становится шероховатым (наблюдаются выступы и впадины различного масштаба от атомных террас до протяженных бугров и впадин с глубиной от 10 до 1000 nm). Таким образом, процесс механического нагружения кристаллов можно рассматривать как процесс образования мелких участков и их разворота относительно друг друга и, как один из вариантов, образования гофрированной структуры поверхности. Отсюда появилась задача о дифракции медленных электронов на периодической гофрированной структуре. Цель данной работы — установление влияния перехода от гладкой к гофрированной поверхности на профили интенсивности дифракционных максимумов на картинах ДМЭ.

Для гофрированной поверхности условия дифракции в направлении бороздок совпадают с таковыми для плоской поверхности. Поэтому дифракцию на гофрированной поверхности — интенсивность рассеяния электронов на этой структуре, можно моделировать рассеянием на одномерной атомной цепочке, повторяющей профиль гофрированной поверхности, и рассматривать угловое распределение интенсивности только в направлении этой цепочки. Расчет интенсивности дифракционных максимумов производился в кинематическом приближении для одномерной периодической зубчатой структуры с зубцами треугольной, симметричной формы. Соотношение (1) определяет

$$I = \left| \frac{\exp i(2Na\pi/\lambda(\cos \varphi \sin(\theta) + \sin \varphi(\cos(\theta) + 1))) - 1}{\exp i(2a\pi/\lambda(\cos \varphi \sin(\theta) + \sin \varphi(\cos(\theta) + 1))) - 1} + \frac{\exp i(2(N-1)a\pi/\lambda(\cos \varphi \sin(\theta) - \sin \varphi(\cos(\theta) + 1))) - 1}{\exp i(2a\pi/\lambda(\cos \varphi \sin(\theta) - \sin \varphi(\cos(\theta) + 1))) - 1} - 1 \right|^2 \times \left| \frac{\sin(2M(N-1)a\pi/\lambda \cos \varphi \sin(\theta))}{\sin 2(N-1)a\pi/\lambda \cos \varphi \sin(\theta)} \right|^2.$$

Величина N атомов на одной образующей есть число рассеивающих M — число зубцов, a — расстояние между соседними атомами, φ — угол наклона образующей к горизонтали, θ — угол рассеяния.

На рис. 1 представлена трансформация угловых зависимостей интенсивности дифракционных максимумов $I(\theta)$ при переходе от гладкой горизонтальной цепочки атомов (рис. 1, *a*) к зубчатой структуре с малым числом атомов на образующей зубца ($N = 4$) и сравнительно большим числом зубцов ($M = 20$) (рис. 1, *b*) и далее к большому числу атомов на образующей зубца ($N = 20$) и малому числу зубцов ($M = 4$) (рис. 1, *c*). Видно, что переход к зубчатым структурам приводит к существенному изменению картины дифракции. Для первой из структур она представляет собой совокупность отдельных максимумов, а для второй — совокупность максимумов, расщепленных на ряд отдельных максимумов.

Для выявления природы дифракционных максимумов, возникающих при рассеянии на зубчатой структуре, строилась серия графиков $I(\theta)$ при различных углах наклона образующих зубца. Для малой величины $\varphi(1^\circ)$ картина дифракции при $N = 4$ и $M = 20$ содержит максимумы, соответствующие дифракции от гладкой горизонтальной

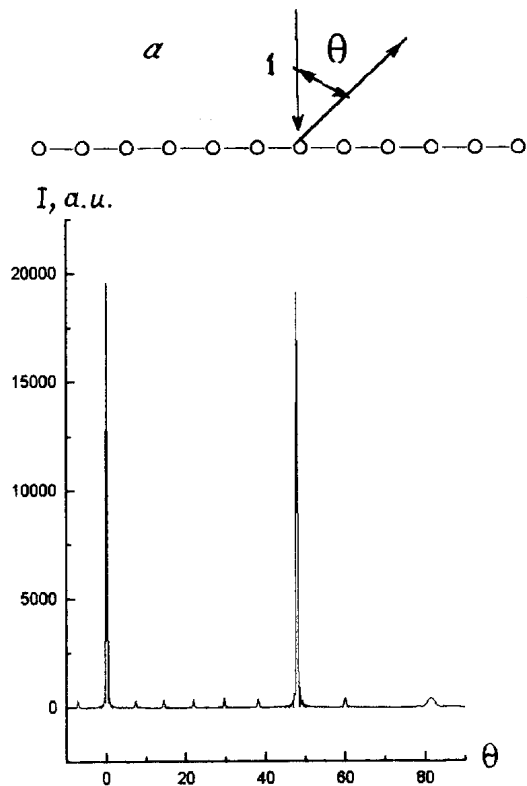


Рис. 1. Угловое распределение интенсивности при дифракции на одномерной цепочке. $E_e = 120$ eV. I — электронный пучок. a — горизонтальная атомная цепочка $M \times M = 80$; b — зубчатая структура, $\varphi = 6$, $N = 4$, $M = 20$; c — зубчатая структура, $\varphi = 6$, $N = 20$, $M = 4$.

цепочки. Увеличение числа атомов на образующей зубца до 20 приводит к значительной трансформации дифракционной картины: наблюдается расщепление максимумов, значительное уменьшение их интенсивности, картины дифракции резко изменяются с энергией электронов. Переход от угла $\varphi = 6^\circ$ к углу $\varphi = 13^\circ$ ($N = 4$, $M = 20$) приводит к менее богатой структуре дифракционной картины, смещению углового положения дифракционных максимумов, разделению этих максимумов

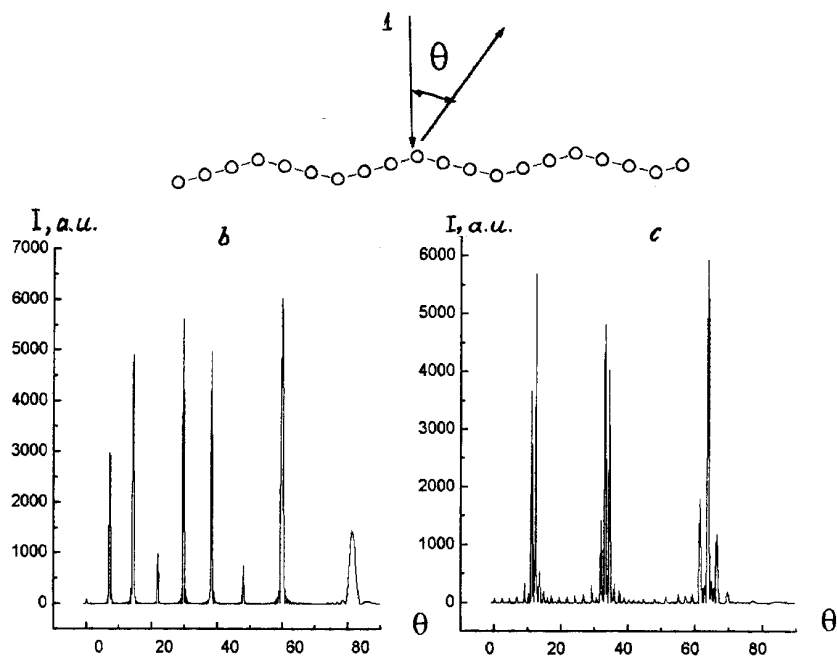


Рис. 1 (продолжение).

на отдельные группы и быстрому изменению их интенсивности с E_p . С увеличением числа атомов на образующей зубца ($N = 20$, $M = 4$) более отчетливо проявляется максимум, соответствующий зеркальному отражению от образующих зубца.

Следующая серия графиков $I(\theta)$ строилась в зависимости от числа зубцов. На рис. 2 представлена дифракционная картина, полученная при дифракции на одном, двух и двадцати зубцах ($N = 4$, $\varphi = 6^\circ$, $E_p = 120$ eV). Все кривые нормировались по отношению к структуре с одним зубцом. Полученные результаты наглядно показывают, что дифракционная структура формируется уже при рассеянии на одном зубце и увеличение числа зубцов в периодической структуре до двадцати приводит лишь к уменьшению угловой ширины дифракционных максимумов. Аналогичные результаты были получены для других значений N и φ .

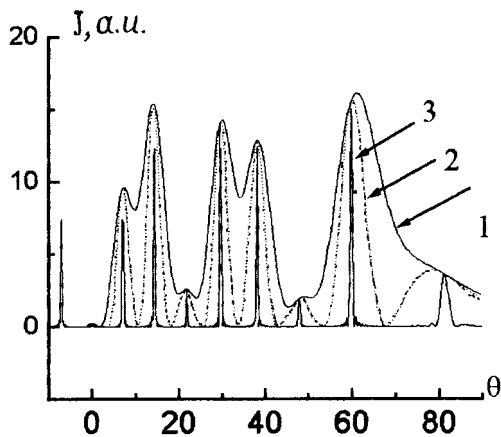


Рис. 2. Угловое распределение интенсивности при различном числе зубцов. Все кривые нормированы на 1 зубец. 1 — один зубец, 2 — два зубца, 3 — двадцать зубцов.

Для выявления природы дифракционных максимумов, возникающих при рассеянии на одном зубце, производились расчеты $I(\theta)$ при различном числе атомов на образующей зубца. Они показали, что изменение N от двух до четырех приводит к значительному изменению дифракционной картины. Увеличение числа атомов на образующей зубца ($N = 10-20-50$) приводит к формированию устойчивого углового распределения дифракционных максимумов. Сравнение углового положения этих максимумов с положением дифракционных максимумов от гладкой цепочки атомов, расположенной под углами $-\varphi$ и $+\varphi$ к горизонтали (в соответствии с образующими зубца), показали, что угловое положение максимумов при дифракции на одном зубце могут быть приписаны максимумам типа (00), (10) и (01), полученным при дифракции от двух гладких атомных цепочек, наклоненных к горизонтали как образующие зубца.

Совокупность представленных расчетов показывает, что уже простейшая одномерная кинематическая модель рассеяния электронов на зубчатой поверхности предсказывает значительную трансформацию картин ДМЭ от гофрированной поверхности по сравнению с таковыми от

гладкой поверхности. Эти изменения в основном связаны с уширением и расщеплением дифракционных максимумов. Для зубчатых структур, содержащих значительное число атомов на образующей зубца, угловое уширение рефлексов позволяет оценить угол наклона образующей зубца к горизонтали. Полученные результаты позволяют оценить параметры гофрированных структур, образующихся при деформировании монокристаллов по изменению картин ДМЭ от нагруженной поверхности.

Список литературы

- [1] Корсуков В.Е., Князев С.А., Лукьяненко А.С. и др. // ФТТ. 1996. Т. 38. В. 1. С. 111–119.
- [2] Князев С.А., Корсуков В.Е., Обидов Б.А. // ФТТ. 1994. Т. 36. С. 315–319.
- [3] Журков С.Н., Корсуков В.Е., Лукьяненко А.С., Обидов Б.А., Смирнов А.П. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. В. 6. С. 324–326.