

УДК 537.533.35

А.А.Степанов (5 курс, каф. ФЭ), О.А.Подсвилов, д.ф.-м. н., проф.

## АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ ТРЕХВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

ABSTRACT: Up to now days, no analytical solution of the three-wave problem of the dynamical theory of diffraction of electrons by crystal has been considered. Widely know analytical solution of the two-wave problem is not very correct and unsuited for the near normal orientation of the electron beam. In the present work, the analytical solution of the three-wave problem and analysis of some cases are presented.

Теоретическое описание дифракции электронов на кристалле появилось более полувека назад, сразу же после обнаружения волновых свойств электронов и возникновения квантовой механики. Однако аналитическое решение задачи динамической дифракции для толстых кристаллов было получено лишь для двухволнового случая [1,2]. Несмотря на то, что позднее были построены алгоритмы численного решения многоволновых задач [2], для физиков всегда предпочтительнее иметь дело с аналитическими решениями, которые позволяют сразу оценить поведение искомых решений в зависимости от ряда параметров. Аналитическое решение трехволновых задач известно лишь для малого числа высокосимметричных случаев [1,2], что не позволяет оценить поведение дифрагированных интенсивностей в зависимости от ориентации пучка электронов и кристалла. Полного решения такой задачи нам не известно, вероятно из-за возникающих серьезных математических трудностей.

Однако, хорошо известно, что трехволновое рассмотрение дифракции более корректно, чем двухволновое, как с математической, так и с физической сторон. Поэтому целью настоящей работы является попытка получить аналитическое решение проблемы динамической трехволновой дифракции электронов на центросимметричном кристалле.

Пусть электрон с энергией  $E$ , рассматриваемый как волна вероятности  $\psi(\mathbf{r}) = \exp(2\pi i \mathbf{k}_0 \mathbf{r})$  с волновым вектором  $|\mathbf{k}_0| = 2mE/h^2$ , падает под углом  $\theta_0$  на кристалл с внутренним потенциалом  $V(r) = V_0 + 2V_g \cos 2\pi g x = V_0 + V_g \exp(2i\pi g x) + V_{-g} \exp(-2i\pi g x)$ . Здесь  $\mathbf{g}$  – вектор обратной решетки,  $g=1/d$ ,  $d$  – межплоскостное расстояние. Фурье коэффициенты потенциала центросимметричного кристалла равны друг другу  $V_g = V_{-g}$ . После подстановки в уравнение Шредингера такого потенциала и волновой функции получим систему трех однородных линейных уравнений:

$$\begin{aligned} (K^2 - k^2)C_0(\mathbf{k}) + U_{-g}C_g(\mathbf{k}) + U_gC_{-g}(\mathbf{k}) &= 0 \\ U_gC_0(\mathbf{k}) + (K^2 - k^2 - g^2 + 2Kg \sin \theta_0)C_g(\mathbf{k}) + U_{2g}C_{-g}(\mathbf{k}) &= 0 \\ U_{-g}C_0(\mathbf{k}) + U_{-2g}C_g(\mathbf{k}) + (K^2 - k^2 - g^2 - 2Kg \sin \theta_0)C_{-g}(\mathbf{k}) &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{K}$  – волновой вектор электрона с учетом преломления на потенциале  $V_0$ :  $K^2 = k_0^2 + U_0$ ,  $U_n = V_n 2me/h^2$ ,  $n = 0, \pm g$ ;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор электронной волны в кристалле. Обозначим  $U_g = U_{-g} = U$ . Решение данной системы сводится к задаче на нахождение собственных значений (волновых векторов) и функций (амплитуд вероятности). Для этого вычисляется определитель матрицы системы. Перейдя к безразмерным величинам, для собственных значений получаем уравнение третьей степени, которое и подвергается анализу:

$$a^3 - 2a^2 + a(1 - w^2 - 2U^2/g^4) + 2U^2/g^4 = 0, \quad (2)$$

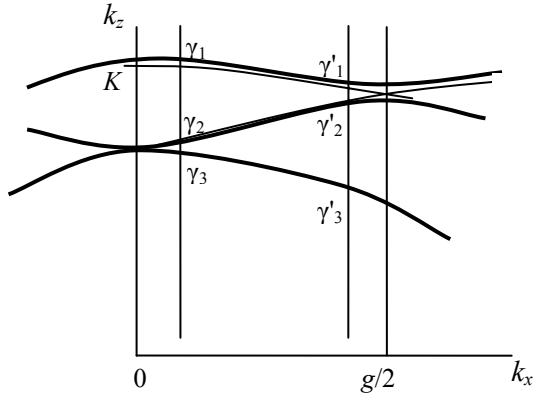


Рис. 1. Вид дисперсионных поверхностей в случае трех волн.

где  $a = (K^2 - k^2)/g^2$ ,  $w$  – параметр отклонения (отношение синусов угла падения к углу Брэгга –  $\sin\theta_0/\sin\theta_B$ ). Любое уравнение 3-й степени в общем случае имеет три корня, которые можно найти по формулам Кардано [3]. Заменой  $a = x + 2/3$  приведем уравнение (2) к каноническому виду:

$$x^3 + px + q = 0, \quad p = -(1/3 + 2u^2 + w^2), \quad q = -(2/3 + w^3)$$

где  $u = U/g^2$ .

Решение уравнения (3) и проведенный анализ показал наличие трех разных вещественных корней –  $x^{(i)}$ ,

причем два из них отрицательны и один – положителен.

$$x_1 = 2\sqrt[3]{\rho} \cos(\omega/3) \quad x_2 = 2\sqrt[3]{\rho} \cos(\omega/3 + 2\pi/3) \quad x_3 = 2\sqrt[3]{\rho} \cos(\omega/3 + 4\pi/3)$$

$$\rho = \sqrt{-(p/3)^3} \quad \cos(\omega) = -q/(2\rho).$$

Каждому найденному волновому вектору соответствует своя блоховская волна, являющаяся суммой трех волн – прямой и двух дифрагированных. В фазовом пространстве  $(k_x, k_y, k_z)$  волновые вектора, закрепленные одним концом на нулевом узле обратной решетки, другим концом описывают дисперсионные поверхности при вариации ориентации пучка и кристалла. Для оценок и проверки решения рассмотрим два важных случая:

- случай падения пучка на кристалл около нормали ( $w = \delta$ ,  $|\delta| \ll 1$ );
- случай вблизи брэгговского отражения ( $w = 1 + \delta$ ,  $|\delta| \ll 1$ ).

В первом случае получаем:  $\rho = \sqrt{(1/9 + w^2/3 + 2u^2/3)^3}$ ,  $\cos(\omega) = [27(1 - 9w^2 + 9u^2)\rho]^{-1}$ ,  $a_1 = 2u^2(1 - 3w^2/2)$ ,  $a_2 = -1 - |w| - u^2$ ,  $a_3 = -1 + |w| - u^2$ .

Из величин  $a_n$  легко получить отклонение собственных волновых векторов от сферы Эвальда радиуса  $K$ :  $\gamma_n = k_n - K = a_n g^2 / 2K$ , что схематично изображено на рис. 1. Важный результат: при  $w = 0$  мы получаем вырождение ( $\gamma_3 = \gamma_2$ ). То есть в этой точке задача сводится к двухволновой теории (два волновых вектора). Полученные результаты совпадают с расчетом симметричного случая динамической теории [2].

Подобным образом решался и второй случай – при ориентации пучка около брэгговского отражения (т.е. вблизи от  $k_x = g/2$ , см. рис. 1 с  $\gamma'_n$ ). Полученные в этом случае результаты близки к двухволновому решению [2] с небольшой добавкой от третьей волны, что также подтверждает правильность выбранного пути решения задачи.

Следующий этап – нахождение амплитуд блоховских волн, каждая из которых есть суперпозиция падающей и двух дифрагированных. Итак, получаем 9 амплитуд, для нахождения которых необходимо 9 уравнений. Три уравнения – граничные условия на входной поверхности, а другие шесть (как соотношения амплитуд) следуют из системы уравнений (1). Такая система уравнений была решена, были получены все собственные функции, т.е. определены амплитуды волн и построено блоховское волновое поле.

Таким образом, получено аналитическое решение трехволновой динамической задачи дифракции электронов на идеальном центросимметричном кристалле. Найдены волновые вектора и амплитуды волн, распространяющихся в кристалле, получены оценки формы дисперсионных поверхностей вблизи симметричных точек в фазовом пространстве, и показано совпадение с результатами двухволновой теории в этих точках, в том числе вырождение (т.е. касание или пересечение дисперсионных поверхностей) в случае падения пучка электронов по нормали к кристаллу.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Р. Хейденрайх. Основы просвечивающей электронной микроскопии. Москва, 1966.
2. П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон, Д. Пэшли, М. Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. Москва, 1968.
3. Г. Н. Шапиро. Высшая алгебра. - Москва, 1935.