

ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ ТРЕХВОЛНОВОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ НА ИДЕАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ

ABSTRACT. The analytical solution of a 3-wave problem of electron diffraction was derived by us earlier. But this solution in symmetric orientation differs from the one in the literature. The numerical solution of multiwave diffraction problem according to our opinion will clarify this question. The program for calculation of wave function, intensity and dispersive surface has been made. Comparison of the program with results of analytical decision is presented in this article.

Теоретическое описание дифракции электронов на кристалле появилось более полувека назад, сразу же после обнаружения волновых свойств электронов и возникновения квантовой механики. Сначала была разработана кинематическая теория дифракции. И хотя она является полезным качественным руководством для интерпретации электронно-микроскопических изображений, она фактически применима только в случаях, когда амплитуда дифрагированной волны ϕ_g мала по сравнению с амплитудой падающей волны ϕ_0 . Поэтому была создана теория динамической дифракции.

Аналитическое решение трехволновой динамической теории было получено лишь для ограниченного числа высокосимметричных случаев [1]. Задачи, учитывающие большее количество лучей могут быть решены только численно. Несмотря на то, что алгоритмы численного решения многоволновых задач известны [2], для физиков всегда предпочтительнее иметь дело с аналитическими решениями, которые позволяют сразу оценить поведения искомых решений от ряда параметров.

При аналитическом решении трехволновой задачи [3] был получен нетривиальный результат, который необходимо проверить. Появилась задача построения численного моделирования для проверки аналитического решения, а также решения многоволновых задач.

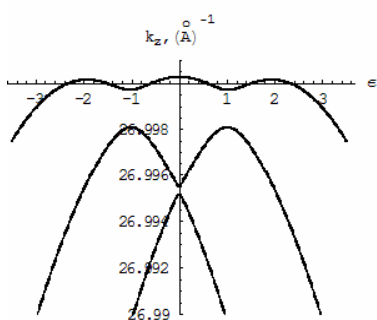


Рис. 1

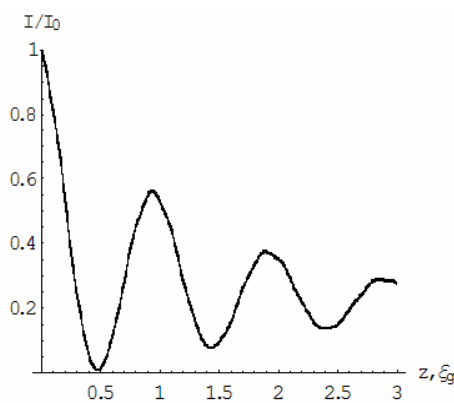


Рис. 2

Решение динамической задачи в общем случае сводится к решению волнового уравнения Шредингера, что приводит к задаче на собственные числа и собственные волновые функции (собственные числа – волновые векторы распространяющихся в кристалле электронных волн, собственные волновые функции –

это их волновые амплитуды). Поглощение, как принято в существующей литературе вводилось путем мнимой добавки к внутреннему потенциалу, входящему в уравнение Шредингера. При моделировании многоволновой задачи дифракции с учетом только систематических отражений $((n\vec{g}, 0, 0)$, где \vec{g} – вектор обратной решетки, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) использовался алгоритм из [2]. Была построена программа в среде Mathematica 5.1, позволяющая рассчитывать волновые вектора, волновые амплитуды, а также интенсивности прямых и дифрагированных волн в зависимости от различных параметров, таких как энергия электронов, толщина кристалла, внутренний потенциал, вектор обратной решетки, а также

взаимной ориентации пучка и отражающих плоскостей. Мерой отклонения пучка от выбранной системы кристаллографических плоскостей является безразмерный параметр ε , являющийся отношением угла между ними к углу Брэгга. Для проверки построенной программы был проведен тестовый расчет для семиволновой задачи по данным, взятым из [1]. Результаты нашего расчета удовлетворительно совпали с расчетом из [1], что подтвердило правильность работы программы.

При расчете трехволновой теории и сравнении с аналитическим решением [3] моделировалось взаимодействие электронного пучка с энергией 100 кэВ с монокристаллом Si(110). На рис. 1 представлено сечение дисперсионных поверхностей, т.е. геометрического места начал рассчитанных волновых векторов при изменении параметра ε . Качественное и количественное совпадение дисперсионных поверхностей (аналитических и численно рассчитанных) дает право говорить о

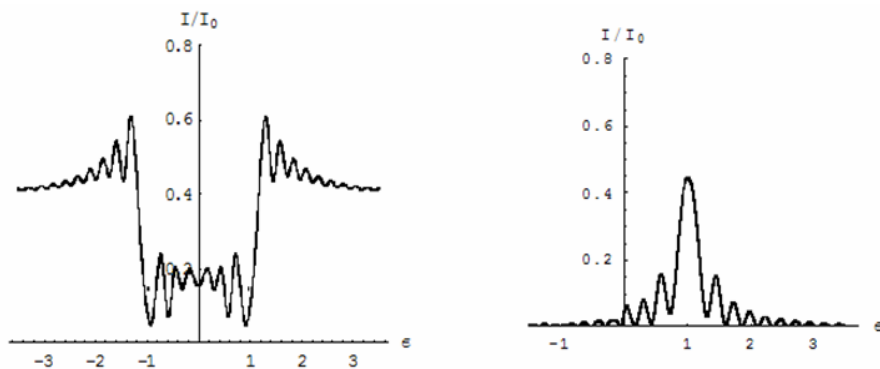


Рис. 3

правильности как аналитического решения, так и расчетной модели. Интересной особенностью аналитического решения [3] является наличие в высокосимметричной ориентировке электронного луча (параллельно плоскостям) трех различных волн, т.е. расщепление всех трех дисперсионных поверхностей, что подтвердилось и численным расчетом (см. рис. 1 при $\varepsilon = 0$). Это отличается от результата, изложенного в [1], где при такой ориентации трехволновая задача переходит в двухволновую из-за вырождения двух волновых функций в условиях симметрии. Из рисунка видно наличие трех решений. Физический смысл и причину такого различия еще предстоит изучить.

На рис. 2 представлена рассчитанная зависимость для интенсивности прямой волны в зависимости от глубины кристалла; на рис. 3 – зависимости для интенсивностей прямой (слева) и дифрагированной (справа) волн в зависимости от отклонения ε .

Таким образом, была разработана программа для расчета зависимостей интенсивностей прямых и дифрагированных волн по глубине кристалла и углу падения, а также для расчета дисперсионных поверхностей, которая дала удовлетворяющие нас результаты. Из рис.1 видно, что никакого вырождения блоховских волн нет, и вопрос, возникший в работе [3] остается открытым.

ЛИТЕРАТУРА:

1. П.Хирш, А.Хови, Р.Николсон, Д.Пэшли, М.Уэлан, Электронная микроскопия тонких кристаллов. М. 1968.
2. Г.Томас, М.Гориндж Дж. Просвечивающая электронная микроскопия материалов. М. 1983.
3. Арельяно Рамирес Иван Дарио. Выпускная работа. 2006.