

Физика

Յ. Ա. ԿԱՏԱՄԱՆՅԱՆ, Զ. Ս. ՅՈՅԲԱՇՅԱՆ

ОБ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ВОЗМОЖНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ФУНКЦИИ ГРИНА ЭЛЕКТРОНА В ТРЕХМЕРНОМ
КРИСТАЛЛЕ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ МЕДЛЕННЫХ
ЭЛЕКТРОНОВ

Рассматривается задача об отражении (или дифракции) электронов малой энергии, когда теория возмущений становится неприменимой. Предполагается, что кристалл обладает трансляционной инвариантностью вдоль плоскости раздела с вакуумом. Для модели кристалла с разделяющимися переменными задача допускает точное решение. При отсутствии разделения переменных в достаточно хорошем приближении задача сводится к квазиодномерной. Получены явные формулы для интенсивностей главного и побочных максимумов дифракции электронов через квазиодномерные функции Грина. Обсуждается вопрос об экспериментальной возможности определения последних, позволяющих в принципе восстановить трехмерную функцию Грина бесконечного кристалла.

Исследование структуры приповерхностной области кристаллов методом отражения или дифракции медленных электронов (ДМЭ) в настоящее время привлекает к себе все возрастающее внимание. При использовании пучка электронов с энергией порядка или более 100 эВ обычно справедлива теория возмущений при рассеянии, а соответствующее борновское приближение дает возможность получить информацию непосредственно о форме потенциала. При ДМЭ теория возмущений становится неприменимой, что затрудняет теоретическое рассмотрение. Между тем полученная при этом экспериментальная информация сравнительно богаче и в принципе позволяет исследовать энергетический спектр системы. Отсутствие общей теории ДМЭ от кристаллической структуры не позволяет корректно вычислить интенсивности дифракционных максимумов, что необходимо для извлечения всей достоверной информации об исследуемой системе. В модельном одномерном случае оказывается возможным развить строгую теорию с использованием функций Грина (ФГ), аналитические свойства которых позволяют получить важные качественные выводы [1]. Несколько другим подходом одномерная теория развита в [2]. В подходе [1] метод ДМЭ позволяет получить информацию об одномерных ФГ, зависящих от совпадающих координат $z = z'$ и энергии E ($G(z, z'; E)$).

В трехмерном случае при отсутствии разделения переменных для кристаллического поля ситуация становится намного сложнее. По этой причине заслуживает внимания задача о рассеянии электронов на трехмерном потенциале Кронига-Пенни [3], результаты которой представляют методический интерес. Здесь, однако, в силу специального выбора параметров задачи поверхностные состояния (ПС) не возника-

ют. В работе [4] принята реалистическая модель рассеяния на ионном остоле, на основе которой удается удовлетворительно объяснить ряд экспериментальных результатов. В настоящей работе развивается теория ДМЭ от кристаллической структуры на основе метода ФГ, позволяющего получить общие формулы для интенсивностей дифракционных максимумов. Хотя метод ФГ в теории ДМЭ применяется нами не впервые (см. [5], а также обзор [6]), его преимущества особенно отчетливо проявляются в связи с возможностью вариации граничных условий. Однако при этом производные от ФГ, обращающиеся в нуль при определенных граничных условиях, в общем случае играют заметную роль. Наиболее важными моментами здесь являются эффективный способ сведения реальной трехмерной задачи к квазиодномерной при отсутствии разделения переменных для кристаллического потенциала и открывающаяся возможность экспериментального определения квазиодномерных, тем самым и истинно трехмерных, ФГ идеальных кристаллов измерением интенсивностей максимумов ДМЭ при различных углах падения пучка электронов на кристалл. Аналогичным образом можно развить теорию прохождения электронов через тонкие кристаллические структуры.

Допустим, частица падает из первой системы во вторую. Границей раздела между ними для простоты считаем плоскость $z=z_0$. Мы полагаем, что для каждой подсистемы, когда они неограниченны со всех сторон (именуемые далее подсистемами I и II), решена квантовомеханическая задача с соответствующими граничными условиями на бесконечности. Точнее, мы знаем трехмерные ФГ G_1 и G_2 , удовлетворяющие уравнениям ($\hbar=2m_0=1, i=1,2$)

$$[E + \vec{\nabla}'^2 - V_i(\vec{r}')] G_i(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1)$$

Уравнение для волновой функции (ВФ) контактной задачи имеет вид

$$[E + \vec{\nabla}'^2 - V_1(\vec{r}')\theta(z_0 - z') - V_2(\vec{r}')\theta(z' - z_0)]\psi(\vec{r}') = 0. \quad (2)$$

Решение уравнения (2) для задачи отражения удобно сформулировать через ФГ G_1 и G_2 . Следуя работе [7], для ВФ контактной задачи можем получить следующие формулы ($\vec{r} = \{\vec{\rho}, z\}$):

$$\psi(\vec{\rho}, z) = \psi_{\text{пад}}(\vec{\rho}, z) + \int d\vec{\rho}' [G_1(\vec{\rho}, z; \vec{\rho}', z_0)\psi'(\vec{\rho}', z_0) - G_1'(\vec{\rho}, z; \vec{\rho}', z_0)\psi(\vec{\rho}', z_0)] \quad \text{при } z < z_0, \quad (3)$$

$$\psi(\vec{\rho}, z) = - \int d\vec{\rho}' [G_2(\vec{\rho}, z; \vec{\rho}', z_0)\psi'(\vec{\rho}', z_0) - G_2(\vec{\rho}, z; \vec{\rho}', z_0)\psi(\vec{\rho}', z_0)] \quad \text{при } z > z_0, \quad (4)$$

где штрих у функций означает производную по z_0 и в виду наличия разрыва у производной ФГ следует отличить односторонние производные.

Формулы (3) и (4) дают явный вид ВФ по обе стороны плоскости раздела через ФГ отдельных подсистем, если известны ВФ и их производные на самой границе. Последние должны находиться из системы интегральных уравнений, получаемой из (3) и (4) предельным переходом $z \rightarrow z_0$.

Задача решается в общем виде, если в одной из подсистем (напри-

мер, в первой) возможно разделение переменных. Допустим, что вне кристалла в любой плоскости $z < z_0$ имеем свободное движение с двумерным волновым вектором \vec{k} , а в области кристалла $z > z_0$ — двумерную трансляционную инвариантность. В направлении z нами не делается пока никаких допущений, что позволяет учитывать такие важные моменты, как плавное падение потенциала поверхности и возможная перестройка приповерхностной области кристалла, как это делается в теории ПС в [8, 9].

При вышеуказанных допущениях трехмерная ФГ 1 подсистемы выражается через одномерную

$$G_1(\vec{\rho}, z; \vec{\rho}', z') = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\rho} - \vec{\rho}')} G_1(z, z'; E - E_{\vec{k}}). \quad (5)$$

Фурье-образ ФГ по двум направлениям второй подсистемы с учетом двумерной периодичности можно представить в виде ($\vec{k} = \vec{n} + \vec{q}$, \vec{q} меняется в пределах двумерной зоны Бриллюэна) билинейного разложения

$$C_2^{\vec{k}, \vec{k}'}(z, z') = - \sum_{\vec{q}} \frac{\langle \psi_{\vec{q} + \vec{n}, q_z}(z) \rangle \langle \bar{\psi}_{\vec{q} + \vec{n}', q_z}(z') \rangle}{E - E(\vec{k}, q_z)} \delta(\vec{q} + \vec{n} - \vec{q}' - \vec{n}'), \quad (6)$$

где

$$\langle \psi_{\vec{q} + \vec{n}, q_z}(z) \rangle = \int d\rho e^{-i(\vec{q} + \vec{n}) \cdot \vec{\rho}} \psi_{\vec{k}, q_z}(\vec{\rho}, z)$$

усредненная в пределах плоской элементарной ячейки ВФ бесконечного кристалла.

Используя [8], систему интегральных уравнений можем свести к алгебраической системе уравнений

$$C_{\vec{q} + \vec{n}} + \sum_{\vec{n}'} J_{\vec{q} + \vec{n}, \vec{q} + \vec{n}'}^+ C_{\vec{q} + \vec{n}'} = \left(J_{\vec{q} + \vec{n}, \vec{q}_0 + \vec{n}_0}^- + \delta_{\vec{n}, \vec{n}_0} \right) \delta_{\vec{q}, \vec{q}_0}, \quad (7)$$

где

$$J_{\vec{q} + \vec{n}, \vec{q} + \vec{n}'}^{\pm} = [\pm 1 + G_1(E - E_{\vec{q} + \vec{n}'})] \frac{G_2^{\vec{q} + \vec{n}, \vec{q} + \vec{n}'}(z_0, z_0)}{G_1(E - E_{\vec{q} + \vec{n}'})} - G_2^{\vec{q} + \vec{n}, \vec{q} + \vec{n}'}(z_0, z_0). \quad (8)$$

Наконец, для интересующих нас коэффициентов можно получить формулы в виде детерминантов

$$C_{\vec{q} + \vec{n}} = N_{\vec{n}} D^{-1} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_0}, \quad D(\vec{k}, E) = |\delta_{\vec{n}, \vec{n}'} + J_{\vec{q} + \vec{n}, \vec{q} + \vec{n}'}^+|, \quad (9)$$

а детерминант $N_{\vec{n}}$ получается из D очевидной заменой.

Квадрат модуля $C_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow$ пропорционален интенсивности соответствующего максимума ДМЭ. Выражение (9) учитывает многоволновую дифракцию и является удобным для выделения двухволнового, трехволнового и т. д. приближений. Чтобы наглядно представить себе ситуацию и обосновать законность такого последовательного рассмотрения, мы исследуем сначала модель кристалла с разделяющимися переменными, когда уравнение (7) допускает точное решение. Действительно, в этом случае квазиодномерная ФГ (6) выражается через одномерную

$$G_{\vec{q}+\vec{n}}^{\vec{q}+\vec{n}, \vec{q}+\vec{n}'}(z, z') = u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow \bar{u}_{\vec{q}+\vec{n}'} \rightarrow G_{\vec{z}}(z, z'; E - E_{\vec{q}}), \quad (10)$$

где $E_{\vec{q}}$ — закон дисперсии, u — периодическая часть функции Блоха в двумерном поле, усредненная, как и выше, обладающая свойством

$$\sum_{\vec{n}} |u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow|^2 = 1.$$

Ядро уравнения (7) является вырожденным

$$J_{\vec{q}+\vec{n}, \vec{q}+\vec{n}'}^{\pm} = u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow I_{\vec{q}+\vec{n}'}^{\pm} \bar{u}_{\vec{q}+\vec{n}'} \rightarrow,$$

что позволяет написать для $C_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow$ замкнутое выражение

$$C_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow = \left\{ \delta_{\vec{n} \vec{n}_0} + u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow \bar{u}_{\vec{q}_0+\vec{n}_0} \rightarrow \frac{I_{\vec{q}_0+\vec{n}_0}^- - I_{\vec{q}_0+\vec{n}_0}^+}{1 + \sum_{\vec{n}'} |u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow|^2 I_{\vec{q}+\vec{n}'}^+} \right\} \delta_{\vec{q} \vec{q}_0}. \quad (11)$$

Теперь примем во внимание, что функция

$$u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow = \int_{\square} e^{i\vec{n} \cdot \vec{\rho}} u_{\vec{q}}(\vec{\rho}) d\vec{\rho}$$

убывает по мере увеличения $\vec{n} = \{\vec{n}_1, \vec{n}_2\}$. Если члены $|u_{\vec{q}+\vec{n}} \rightarrow|^2 I_{\vec{q}+\vec{n}'}^+$ убыва-

ют достаточно быстро, так что можно ограничиться членом $\vec{n} = (0, 0)$ (двухволновое приближение), из (7) можно получить простые формулы для различных максимумов ДМЭ и оценить вклад остальных членов.

При малых \vec{q} при вычислении суммы в (11) двухволновое приближение является достаточно хорошим. Сделанное утверждение остается справедливым и в общем случае неразделяющихся переменных. Это позволяет решить уравнение (7) методом последовательных приближений. В двухволновом приближении имеем

$$C_{\vec{q}}^0 = 1 + J_{\vec{q}_0 \vec{q}_0}^- \left(1 + J_{\vec{q} \vec{q}}^+ \right)^{-1} \delta_{\vec{q} \vec{q}_0}. \quad (12)$$

В следующем приближении, когда учитываются лишь члены, в которых

один из индексов в $J_{\pm, n, n'}^{\pm}$ отличен от нуля и принимает значения ± 1 ,
имеем

$$C_{\pm, q}^{\pm 1} = \left[J_{\pm 0, 1}^{\pm} - J_{\pm, 0}^{\pm} \left(1 + J_{0, 0}^{\pm} \right) \left(1 + J_{0, 0}^{\pm} \right)^{-1} \right] \delta_{\pm, q_0} \quad (13)$$

и аналогичным образом можем получить формулы для остальных максимумов.

Важно отметить, что и в случае неразделяющихся переменных амплитуды отражения выражаются через ФГ (6), имеющие структуру, аналогичную одномерной и в связи с этим названные нами квазиодно-

мерными. Для фиксированного k они обладают аналогичными аналитическими свойствами, позволяющими выяснить основные качественные закономерности ДМЭ без конкретизации периодического поля кристалла. В отличие от модельной одномерной в трехмерной теории фигурирует непрерывное семейство квазиодномерных ФГ, зависящих от k . Это обстоятельство может служить основой и для решения обратной задачи, а именно восстановления ФГ электрона в кристалле. Информацию о квазиодномерных ФГ можно получить измерением интенсивностей различных максимумов ДМЭ при варьировании энергии падающих электронов E и двумерного волнового вектора \vec{k} (различные углы падения). Со-

вокупность квазиодномерных ФГ $G_2^{\vec{q}+\vec{n}, \vec{q}+\vec{n}'}(z_0, z_0; E)$ позволяет получить ФГ в трехмерном случае с помощью формулы (5) обратным преобразованием. Для наглядности рассмотрим частный случай, когда потенциал кристалла является идеально периодическим и достигает экстремума на границе кристалла. Тогда интенсивность главного дифракционного максимума в двухволновом приближении имеет вид

$$|C_{\pm, q}^{\circ}|^2 = \left| \frac{G_1(z_0, z_0; E - E_{\pm, q}) - [1 + G_1(z_0, z_0; E - E_{\pm, q})] G_2^{\vec{q}, \vec{q}}(z_0, z_0; E)}{(G_1(z_0, z_0; E - E_{\pm, q}) + [1 + G_1(z_0, z_0; E - E_{\pm, q})] G_2^{\vec{q}, \vec{q}}(z_0, z_0; E))} \right|^2 \quad (14)$$

В области энергий, соответствующих одномерным запрещенным зонам трехмерной задачи

$$E_v(\vec{q}) < E < E_c(\vec{q}),$$

коэффициент отражения обращается в единицу. Поскольку на границе раздела вакуум-кристалл могут возникнуть поверхностные состояния, которые в силу двумерной периодичности сливаются в двумерную подзону, то при ДМЭ можно получить также сведения о последних.

*Кафедра полупроводников
и диэлектриков,
кафедра общей физики*

Поступила 29.05.1978

ЛИТЕРАТУРА

1. Касаманян Э. А., Юзбашян Э. С., Мол. научн. работник ЕГУ, 2: (24), 59, 1976.
2. Бродский А. М., Урбах М. И., ФТТ, 17, 2669, 1975.

3. Погорельский К. С., Дворякин В. Ф., Митягин А. Ю., ФТТ, 11, 3225, 1969.
4. Pendry J. B., J. Physics, C 4, 2501, 1971.
5. Bartoš I., Velický B., Surf-Sci., 47, 495, 1975.
6. Garcia-Moliner F., Ann.Phys., 2, 179, 1977.
7. Iadonisi G., Preziosi B., Nuovo Cim., 27B, 193, 1975.
8. Կասամայան Յ. Ա., Изв. АН Арм. ССР, Физика, 11, 436, 1976.
9. Կասամայան Յ. Ա., Կասամայան Յ. Ա., Изв. АН Арм. ССР, Физика, 12, 129, 1977.

Չ. 2. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ, Է. Ս. ՅՈՒՋՔԱՆՅԱՆ

ԿԱՆԿԱՂ ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՄԵԹՈԴՈՎ ԵՌԱԶՊ ՔՅՈՒՐԵՂՈՒՄ ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ԿՐԻՆԻ ՖՈՒՆԿՑԻԱՅԻ ՓՈՐՁՆԱԿԱՆ ՈՐՈՇՄԱՆ ՄԱՍԻՆ

Ա մ փ ո փ ու մ

Ուսումնասիրվում է դանդաղ էլեկտրոնների անդրադարձման (կամ դիֆրակցիայի) խնդիրը, երբ խոտորումների տեսությունը կիրառելի չէ: Ենթադրվում է, որ վակուում-բյուրեղ բաժանման հարթ սահմանի երկայնքով բյուրեղն օժտված է պարբերական տեղափոխման հատկությամբ: Փոփոխականների անջատումով բյուրեղային մոդելի համար հնարավոր է խնդրի ճշգրիտ լուծում: Եթե փոփոխականների անջատում հնարավոր չէ, բավականին լավ մոտավորությամբ խնդիրը բերվում է քվազիմիաչափ դեպքի: Էլեկտրոնների դիֆրակցիայի գլխավոր և երկրորդային մաքսիմումների և մինիմումների ինտենսիվությունների բանաձևերը արտահայտված են քվազիմիաչափ Գրինի ֆունկցիաներով: Քննարկված է վերջիններիս փորձնական որոշման հարցը, որը հնարավորություն է տալիս սկզբունքորեն վերականգնել անվերջ բյուրեղի եռաչափ Գրինի ֆունկցիան: