

П  
Д 81



С. Л. Дударев, М. И. Рязанов

201 3345  
111111

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ  
ПРИ КОГЕРЕНТНОМ  
И НЕКОГЕРЕНТНОМ РАССЕЯНИИ  
ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ  
В МОНОКРИСТАЛЛЕ

006-84

Москва 1984

П  
1181

Министерство высшего и среднего специального  
образования СССР

Московский ордена Трудового Красного Знамени  
инженерно-физический институт

С.Л.Дударев, М.И.Рязанов

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ КОГЕРЕНТНОМ И  
НЕКОГЕРЕНТНОМ РАССЕЯНИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В  
МОНОКРИСТАЛЛЕ

Утверждено  
редсоветом института

БИБЛИОТЕКА  
МИФИ

Москва 1984

НАУЧНАЯ  
БИБЛИОТЕКА  
МИФИ

УДК 537.533.74

Дударев С.Л., Рязанов М.И. Интерференционные явления при когерентном и некогерентном рассеянии заряженных частиц в монокристалле. - М.: Препринт МИФИ, 006-84, 1984 г., 28с.

Рассматривается решение квантового кинетического уравнения для быстрых нерелятивистских электронов в кристалле. С учетом взаимного влияния динамической дифракции и некогерентного (теплого и ионизационного) рассеяния получены угловые и энергетические распределения вылетающих из монокристалла частиц.

При движении быстрой заряженной частицы в неоднородной среде ее волновая функция представляет собой результат интерференции волн, рассеянных атомами вещества. При этом в зависимости от характера расположения рассеивателей может происходить когерентное или некогерентное сложение рассеянных волн. Например, в идеальном монокристалле с периодическим расположением атомов рассеянные волны складываются когерентно, приводя к максимумам интенсивности в брэгговских направлениях. Однако в реальных кристаллах атомы участвуют в тепловом движении и их мгновенное расположение нерегулярно, что приводит к некогерентному рассеянию. Помимо этого, быстрая частица при столкновениях с атомами теряет энергию на ионизацию, возбуждение других степеней свободы кристалла. Эти процессы также некогерентны, так что в реальных монокристаллах рассеяние носит одновременно и когерентный и некогерентный характер.

Таким образом, представляет интерес оценка взаимного влияния различных типов рассеяния и их роли в формировании выходящего из образца потока частиц. Необходимость теоретического рассмотрения этой задачи связана также с широким развитием в настоящее время методов анализа строения вещества с помощью пучков заряженных частиц. Наиболее распространенным из этих методов является электронография материалов, в которой обычно используются электроны с энергией 10 - 100 кэВ [1-4].

Поскольку длина свободного пробега электронов относительно неупругих столкновений в этой области энергий составляет величину порядка тысячи ангстрем [5, 6], в достаточно толстых образцах необходимо принимать во внимание существенно многократный характер когерентного и некогерентного рассеяния.

Вопрос о вычислении углового и энергетического распределения электронов, прошедших или отраженных от толстого монокристаллического образца, рассматривался многими авторами [7-11]. Однако использованное в [7, 8] приближение однократного некогерентного рассеяния не позволяет использовать полученные там выражения в случае, когда толщина кристалла превышает длину свободного пробега. Другие подходы, использующие разделение кристалла на последовательно расположенные пластинки [9] или улуч-

шенные варианты теорий однократного рассеяния [10, 11], не позволяют даже в простейших случаях получить аналитические выражения для углового распределения вылетающих из кристалла частиц. Наиболее последовательным методом описания процессов многократного рассеяния является квантовое кинетическое уравнение для матрицы плотности быстрых электронов, предложенное А.Б.Мигдалом [12, 13], и обобщенное на случай кристалла Ю.Каганом и Ю.В.Концом [14]. Однако решение последнего уравнения удается найти лишь в отдельных случаях, что затрудняет подробный качественный анализ результатов [15-17]. Заметим также, что уравнения [12-16] соответствуют малоугловому приближению в задачах прохождения тонких слоев вещества. Это не позволяет использовать их для анализа распределения обратно рассеянных частиц. В [17] было проведено феноменологическое описание многократного рассеяния на произвольные углы  $\vartheta \gtrsim 1$ . Однако при этом не учитывалась когерентность поля падающих электронов, что привело к неверным выражениям для источников (формула (6) из [17]). Помимо этого, не удалось рассчитать тонкую структуру углового распределения обратно рассеянных частиц, возникающую вследствие дифракции некогерентного поля на кристаллографических плоскостях.

Ниже для решения перечисленных задач в локально-эйкональном приближении построено стационарное квантовое кинетическое уравнение. Это уравнение учитывает как дифракцию на регулярном расположении атомов в динамической теории, так и многократное неупругое (некогерентное) рассеяние. С помощью этого уравнения в ряде практически важных случаев удается получить простые аналитические выражения для распределений электронов, прошедших или отраженных от монокристаллического образца.

## 1. Квантовое кинетическое уравнение в локально-эйкональном приближении

Эйкональное приближение в квантовой механике используется в тех случаях, когда проходящая через некоторую область пространства с потенциалом  $U(\vec{r})$  частица изменяет свой импульс на величину  $\Delta p$ , малую по сравнению с начальным значением импульса  $p$ . Если начальное состояние частицы описывается плоской волной, то малость  $\Delta p$  позволяет искать решение волнового урав-

нения в занятой потенциалом области в виде ( $\hbar = 1$ )

$$\Psi(\vec{z}) = \exp(i\vec{p}\vec{z}) F(\vec{p}, \vec{z}), \quad (1.1)$$

где  $F(\vec{p}, \vec{z})$  — медленно меняющаяся по сравнению с экспонентой функция, так что при подстановке (1.1) в волновое уравнение можно пренебречь вторыми производными  $F$  по координатам. В том случае, когда падающая волна — не плоская, т.е. представляет собой суперпозицию плоских волн  $(2\pi)^{-3} \int d^3p C(\vec{p}) \exp(i\vec{p}\vec{z})$ , вместо (1.1) следует написать

$$\Psi(\vec{z}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} C(\vec{p}) \exp(i\vec{p}\vec{z}) F(\vec{p}, \vec{z}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} g(\vec{p}, \vec{z}, t) \exp(i\vec{p}\vec{z}). \quad (1.2)$$

Если описываемая система имеет другие степени свободы с координатами  $Q$ , то

$$\Psi(\vec{z}, Q, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} g(\vec{p}, \vec{z}, Q, t) \exp(i\vec{p}\vec{z}) \quad (1.3)$$

и поведение частицы может быть описано матрицей плотности

$$\rho(\vec{z}, \vec{z}', t) = \sum_Q \Psi(\vec{z}, Q, t) \Psi^*(\vec{z}', Q, t) = \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \exp(i\vec{p}\vec{z} - i\vec{p}'\vec{z}') W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}', t), \quad (1.4)$$

где введено обозначение:

$$W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}', t) = \sum_Q g(\vec{p}, \vec{z}, Q, t) g^*(\vec{p}'; \vec{z}'; Q, t). \quad (1.5)$$

При прохождении быстрых частиц в веществе часто возникает ситуация, когда в малой области вещества импульс частицы изменяется мало, хотя в толстом слое полное изменение импульса может стать существенным. Тогда очевидно, что в некоторой малой области рассеивающей среды можно считать, что матрица плотности имеет вид (1.4). Это предположение является основным для вводимого ниже приближенного метода решения квантового кинетического уравнения, который естественно назвать локально-эйкональным.

Для применимости этого метода необходимо, чтобы функция  $W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}', t)$  менялась бы на расстояниях, существенно превышающих  $\rho^{-1}$ , а также характерный размер отдельного рассеивателя:

$$\left| \frac{\partial W}{\partial \vec{z}} \right| ; \left| \frac{\partial W}{\partial \vec{z}'} \right| \ll \rho W, \kappa W, G W, \quad (1.6)$$

где  $\kappa = m e^2 Z^{1/3}$ , а  $G$  - первый вектор обратной решетки кристалла.

При выполнении (1.6) величина

$$W(\vec{p}, \vec{z}, t) \equiv W(\vec{p}, \vec{p}; \vec{z}, \vec{z}, t) \quad (1.7)$$

оказывается положительно определенной и ее можно интерпретировать как распределение вероятностей различных значений импульса электрона вблизи точки  $\vec{z}$ .

Рассмотрим движение быстрого электрона в кристалле. В приближении (1.6) матрица плотности всей системы удовлетворяет уравнению:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} + \frac{\vec{p}'}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}'} \right) W(\vec{p}, \vec{p}'; j, l; \mu, \nu; \vec{z}, \vec{z}', t) + \\ & + i (\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'} + E_j - E_l) W(\vec{p}, \vec{p}'; j, l; \mu, \nu; \vec{z}, \vec{z}', t) = \quad (1.8) \\ & - i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left[ \sum_{n, s} \langle j, \mu | U(\vec{q}) | n, s \rangle W(\vec{p} - \vec{q}; \vec{p}'; n, l; s, \nu; \vec{z}, \vec{z}', t) - \right. \\ & \left. - \sum_{n, s} \langle n, s | U'(\vec{q}) | l, \nu \rangle W(\vec{p}, \vec{p} + \vec{q}; j, n; \mu, s; \vec{z}, \vec{z}', t) \right], \end{aligned}$$

где  $\varepsilon_{\vec{p}} = p^2/2m$ , а индексы  $j, l$  и  $\mu, \nu$  обозначают соответственно квантовые числа электронных и фоновых состояний. Соотношение (1.5) при этом имеет вид:

$$W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}', t) = \sum_{j, \mu} W(\vec{p}, \vec{p}'; j, j; \mu, \mu; \vec{z}, \vec{z}', t). \quad (1.9)$$

Величина  $\langle j, \mu | U(\vec{q}) | n, s \rangle$  представляет собой матричный элемент потенциала взаимодействия электрона с кристаллом (суммирование идет по всем атомам  $a$  и по всем электронам данного атома  $\lambda$ ):

$$U(\vec{z}) = - \sum_a \frac{Z_a e^2}{|\vec{z} - \vec{R}_a - \vec{u}_a|} + \sum_{a, \lambda} \frac{e^2}{|\vec{z} - \vec{R}_a - \vec{u}_a - \vec{p}_{a\lambda}|}, \quad (1.10)$$

где  $Z_a$  - заряд ядра атома среды;  $\vec{R}_a$  обозначает равновесное положение атома;  $\vec{U}_a$  - его тепловое смещение, а координаты электронов  $\vec{r}_{as}$  отсчитываются от мгновенного положения центра атома  $a$ . При этом необходимо помнить, что вследствие (1.6)  $U(\vec{q})$  и  $U'(\vec{q})$  отличны от нуля, когда  $\vec{r}$  и  $\vec{r}'$  соответственно находятся внутри рассеивающей среды  $\Omega$ . Для  $\vec{r}, \vec{r}' \notin \Omega$

$$U(\vec{q}) = U'(\vec{q}) \equiv 0.$$

Диагональные элементы (1.10) соответствуют усредненному расположению атомов, которое приводит к когерентной брэгговской дифракции, а недиагональные элементы, которые можно назвать флуктуационной частью потенциала

$$\langle j, \mu | \delta U(\vec{q}) | n, s \rangle = \langle j, \mu | U(\vec{q}) | n, s \rangle (1 - \delta_{jn} \delta_{\mu s}), \quad (1.11)$$

приводят к неупругим процессам электронных и фоновых возбуждений.

Чтобы получить замкнутое кинетическое уравнение для одночастичной функции (1.9), необходимо (1.8) просуммировать по  $j$  и  $\mu$ . При этом вследствие условия (1.6) слагаемые правой части, содержащие матричные элементы флуктуаций, можно вычислить в борновском приближении теории возмущений для рассеяния на отдельном атоме [12, 18]. Например,

$$\begin{aligned} & \langle j, \mu | \delta U(\vec{q}) | n, s \rangle W(\vec{p} - \vec{q}, \vec{p}'; n, j; s, \mu; \vec{r}, \vec{r}', t) = \\ & = -i\pi \delta(\varepsilon_{\vec{p}-\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}'} + E_n - E_j) \times \\ & \times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\ell, \eta} \left\{ \langle j, \mu | \delta U(\vec{q}) | n, s \rangle \langle n, s | \delta U(\vec{k}) | \ell, \eta \rangle \times \right. \quad (1.12) \\ & \quad \times W(\vec{p} - \vec{k} - \vec{q}, \vec{p}'; \ell, j; \eta, \mu; \vec{r}, \vec{r}', t) - \\ & - \langle j, \mu | \delta U(\vec{q}) | n, s \rangle \langle \ell, \eta | \delta U'(\vec{k}) | j, \mu \rangle \times \\ & \quad \left. \times W(\vec{p} - \vec{q}, \vec{p}' + \vec{k}; n, \ell; s, \mu; \vec{r}, \vec{r}', t) \right\}. \end{aligned}$$

Отметим, что отброшенные в (1.12) слагаемые с главными значениями интегралов имеют на порядок меньшую величину и находятся за

пределами точности современных экспериментальных измерений [3].

После подстановки (1.12) в (1.8), пренебрегая в правой части (1.12) отличиями состояния кристалла от термодинамически равновесного [19] и суммируя диагональные элементы (1.8) по  $j$  и  $\mu$  согласно (1.9), находим

$$\begin{aligned}
 & \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} + \frac{\vec{p}'}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}'} \right) W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}', t) + i (\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'}) W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}') = \\
 & = -i \sum_{\vec{k}} \Lambda(\vec{k}) \left\{ \theta(\vec{z}) W(\vec{p} - \vec{k}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}'; t) - \theta(\vec{z}') W(\vec{p}, \vec{p}' + \vec{k}; \vec{z}, \vec{z}'; t) \right\} + \\
 & + \pi \theta(\vec{z}) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left[ \theta(\vec{z}') \sum_{\vec{k}, j} \sigma_j(\vec{k} - \vec{q}, \vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p} - \vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}'} - E_{j_0}) \times \right. \\
 & \times W(\vec{p} - \vec{q}, \vec{p}' + \vec{k} - \vec{q}; \vec{z}, \vec{z}', t) - \\
 & \left. - \sum_{\vec{k}, j} \sigma_j(\vec{q}, \vec{k} - \vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p} - \vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}'} + E_{j_0}) W(\vec{p} - \vec{k}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}', t) \right] + \\
 & + \pi \theta(\vec{z}') \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left[ \theta(\vec{z}) \sum_{\vec{k}, j} \sigma_j(\vec{q}, \vec{k} - \vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}' + \vec{q}} + E_{j_0}) \times \right. \\
 & \times W(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q}; \vec{p}' + \vec{q}; \vec{z}, \vec{z}', t) - \\
 & \left. - \sum_{\vec{k}, j} \sigma_j(\vec{k} - \vec{q}, \vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}' + \vec{q}} - E_{j_0}) W(\vec{p}, \vec{p}' + \vec{k}; \vec{z}, \vec{z}', t) \right],
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

где  $E_{j_0} = E_j - E_0$  - энергия возбуждения электронной подсистемы, а суммирование по  $\vec{k}$  производится по всем векторам обратной решетки кристалла. Функция  $\theta(\vec{z})$  определена соотношением

$$\theta(\vec{z}) = \begin{cases} 1 & ; \vec{z} \in \Omega \\ 0 & ; \vec{z} \notin \Omega \end{cases} \tag{1.14}$$

и задает область пространства, которая занята рассеивающей средой. В (1.13) введено обозначение

$$\sum_{j, \mu} \langle j, \mu | U(\vec{q}) | j, \mu \rangle \rho_{\text{кр}}(j, j; \mu, \mu) = (2\pi)^3 \sum_{\vec{k}} \Lambda(\vec{k}) \delta(\vec{k} - \vec{k}), \tag{1.15}$$

$$\sum_{\ell, \eta} \langle \ell, \eta | \delta U(\vec{q}) | j, \mu \rangle \langle j, \mu | \delta U(\vec{k}) | \ell, \eta \rangle \rho_{\text{кр}}(\ell, \ell; \eta, \eta) = \quad (1.16)$$

$$= (2\pi)^3 \sum_{\vec{\mathcal{K}}} \sigma_j(\vec{q}, \vec{k}) \delta(\vec{q} + \vec{k} - \vec{\mathcal{K}}).$$

В (1.15) величины  $\Lambda(\vec{\mathcal{K}})$  представляют собой фурье-компоненты регулярного потенциала кристалла:

$$\Lambda(\vec{\mathcal{K}}) = N \sum_{\alpha} U_{\alpha}(\vec{\mathcal{K}}) \exp(-i \vec{\mathcal{K}} \vec{r}_{\alpha}) \exp(-\frac{1}{2} M_{\alpha}(\vec{\mathcal{K}})). \quad (1.17)$$

Соответствующие слагаемые в правой части (1.13) описывают процессы когерентной брэгговской дифракции. В неупругих интегралах столкновений параметр

$$\sigma_0(\vec{q}, \vec{k}) = N \sum_{\vec{n}} \exp(-i \vec{k} (\vec{R}_{\vec{n}} - \vec{R}_{\vec{m}})) \Phi(\vec{q}, \vec{k}, \vec{R}_{\vec{n}} - \vec{R}_{\vec{m}});$$

$$\Phi(\vec{q}, \vec{k}, \vec{R}_{\vec{n}} - \vec{R}_{\vec{m}}) = \sum_{\alpha, \beta} U_{\alpha}(\vec{q}) U_{\beta}(\vec{k}) \exp(-i \vec{q} \vec{r}_{\alpha} - i \vec{k} \vec{r}_{\beta}) \times \quad (1.18)$$

$$\cdot \left\{ \exp(-\frac{1}{2} M_{\alpha}(\vec{q}) - \frac{1}{2} M_{\beta}(\vec{k})) \left[ \exp(Y_{\alpha\beta}(\vec{q}, \vec{k}, \vec{R}_{\vec{n}} - \vec{R}_{\vec{m}})) - 1 \right] \right\}$$

представляет собой сечение рассеяния на тепловых флуктуациях потенциала кристалла [20]. Сечение неупругого рассеяния с возбуждением атомных электронов имеет вид [21]:

$$\sigma_j(\vec{q}, \vec{k}) = N \frac{(4\pi e^2)^2}{q^2 k^2} \sum_{\alpha} \exp(-i(\vec{k} + \vec{q}) \vec{r}_{\alpha}) \times \quad (1.19)$$

$$\times \exp(-\frac{1}{2} M_{\alpha}(\vec{k} + \vec{q})) f_{0j}^{(\alpha)}(\vec{q}) f_{j0}^{(\alpha)}(\vec{k});$$

$$f_{0j}^{(\alpha)}(\vec{q}) = \langle 0 | \sum_s \exp(-i \vec{q} \vec{r}_{\alpha s}) | j \rangle. \quad (1.20)$$

Амплитуды процессов ионизации атомов (1.20) в водородоподобной модели аналитически рассчитаны в [22]. В выражениях (1.17)–(1.19)  $N$  – число элементарных ячеек кристалла в единице объема, суммирование по  $\alpha$ ,  $\beta$  проводится по атомам отдельной ячейки, индексы  $\vec{n}$ ,  $\vec{m}$  обозначают положение центров различных ячеек.

Согласно условию (1.16) функция  $W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}'; t)$  непрерывна по  $\vec{z}$ ,  $\vec{z}'$  на границах рассеивающей среды  $\Omega$ , зада-

ваемых  $\theta(\vec{z})$  и  $\theta(\vec{z}')$ . Для падающей плоской волны при  $\vec{z}, \vec{z}' \in (\text{границе } \Omega)$  условие к (1.13) имеет вид

$$W(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{z}, \vec{z}'; t) = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{\pi}) \delta(\vec{p} - \vec{p}'), \quad (1.21)$$

где  $\vec{\pi}$  - начальный импульс электронов.

Отметим, что в пренебрежении в (1.13) слагаемыми с  $\vec{\mathcal{K}} \neq 0$ , что отвечает однородному расположению рассеивателей, квазиклассическая плотность вероятности  $W(\vec{p}, \vec{z}, t)$  (1.7) удовлетворяет транспортному уравнению

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} \right) W(\vec{p}, \vec{z}, t) = \\ & = \theta(\vec{z}) \left[ \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^2} \sum_j \sigma_j(\vec{q}, -\vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} - E_{j_0}) W(\vec{p}+\vec{q}, \vec{z}, t) - \right. \\ & \left. - \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^2} \sum_j \sigma_j(\vec{q}, -\vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} + E_{j_0}) W(\vec{p}, \vec{z}, t) \right] \end{aligned} \quad (1.22)$$

с граничным условием

$$W(\vec{p}, \vec{z}, t) = \delta(\vec{p} - \vec{\pi}).$$

## 2. Когерентное и некогерентное волновое поле

Когерентным полем в рассеивающей среде принято называть волновое поле частиц, не испытавших рассеяния на случайных неоднородностях, т.е. на флуктуациях потенциала типа (1.11) [23]. Для падающей на кристалл плоской волны (1.21) когерентное поле состоит из проходящей волны и волн, дифрагировавших на периодическом потенциале. Некогерентное поле составляют электроны, испытавшие неупругое рассеяние. Волновые функции таких электронов некоррелированы по фазе с падающей плоской волной (1.21).

Когерентное поле в кристалле при условии (1.21) описывается набором матричных элементов:

$$\{W_{eh}(\vec{z}, \vec{z}')\} = \{W(\vec{\pi} + \vec{G}_e; \vec{\pi} + \vec{G}_h; \vec{z}, \vec{z}')\}, \quad (2.1)$$

где  $\{\vec{G}_e\}$  - совокупность векторов обратной решетки кристалла. В приближении (1.6) уравнения для  $W_{eh}$  можно получить из (1.13):

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\vec{\pi} + \vec{G}_e}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} + \frac{\vec{\pi} + \vec{G}_h}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}'} \right) W_{eh} + i(\varepsilon_e - \varepsilon_h) W_{eh} = \\ & = -i\theta(\vec{z}) \sum_s \left( \Lambda_{es} - \frac{i}{2} \gamma_{es}^h \right) W_{sh} + i\theta(\vec{z}') \sum_s W_{es} \left( \Lambda_{sh} + \frac{i}{2} \gamma_{sh}^e \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

с граничным условием (1.21)

$$W_{se}(\vec{z}, \vec{z}') = \delta_{s0} \delta_{e0}, \quad (2.3)$$

где  $\Lambda_{es} = \Lambda(\vec{G}_e - \vec{G}_s)$ ;  $\varepsilon_e = (\vec{\pi} + \vec{G}_e)^2 / 2m$ ;

$$\gamma_{es}^h = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^2} \sum_j \sigma_j (\vec{\pi} + \vec{G}_e - \vec{p}, \vec{p} - \vec{\pi} - \vec{G}_s) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_e + E_{j0}).$$

Как видно из (2.2), неупругое рассеяние приводит к появлению в уравнениях для когерентного поля мнимых добавок к фурье-компонентам регулярного потенциала кристалла [5]. Вследствие этого полная вероятность нахождения электрона в когерентном поле убывает с увеличением глубины проникновения в кристалл.

Заметим, что согласно (2.2) когерентное поле в кристалле даже в направлениях, далеких от плотноупакованных кристаллографических плоскостей, затухает на глубине  $z \sim v/\Gamma = v/\gamma_{\infty}$ , превышающей длину свободного пробега в аморфном веществе того же состава. Это явление, связанное с уменьшением полного сечения неупругих процессов в кристалле (в модели Эйнштейна теплового движения см. [18]), экспериментально наблюдалось в [24].

Как известно, дифракция некогерентно рассеянных электронов приводит к появлению узких Кикучи-полос с угловой шириной

$$\vartheta_k \sim \frac{\Gamma}{\pi} \ll \frac{\alpha}{\pi} \sim \vartheta_{\text{одн. рас}} \quad (2.4)$$

на диффузном фоне многократного рассеяния [4, 7]. Вследствие условия (2.4) в первом приближении дифракцией некогерентного

поля можно пренебречь. Тогда уравнение для функции распределения неупруго рассеянных электронов  $C(\vec{p}, \vec{z})$  внутри кристалла можно получить, отбрасывая слагаемые с  $\mathcal{K} \neq 0$  и приравнявая  $\vec{p} = \vec{p}'$ ,  $\vec{z} = \vec{z}'$

$$\begin{aligned} \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} C(\vec{p}, \vec{z}) &= \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \sum_j \sigma_j(\vec{q}; -\vec{q}) \cdot \\ &\times (C(\vec{p} + \vec{q}, \vec{z}) \delta(\varepsilon_{\vec{p} + \vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} - E_{j_0}) - \\ &\quad - C(\vec{p}, \vec{z}) \delta(\varepsilon_{\vec{p} + \vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} + E_{j_0})) + \quad (2.5) \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{h, e} \sum_j \sigma_j(\vec{\pi} + \vec{G}_e - \vec{p}, \vec{p} - \vec{\pi} - \vec{G}_h) W_{he}(\vec{z}, \vec{z}) \cdot \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left\{ \delta(\varepsilon_{\vec{p}} + E_{j_0} - \varepsilon_h) + \delta(\varepsilon_{\vec{p}} + E_{j_0} - \varepsilon_e) \right\}. \end{aligned}$$

Как видно из (2.5), уход частиц из состояний когерентного поля (2.1) является источником поля некогерентно рассеянных частиц. Действительно, интегрируя (2.5) по импульсам и суммируя с уравнениями для диагональных элементов (2.2), можно получить квазиклассическое условие сохранения потока:

$$\operatorname{div} \left( \int \frac{\vec{p}}{m} C(\vec{p}, \vec{r}) d^3 p + \sum_h \frac{\vec{\pi} + \vec{G}_h}{m} W_{hh}(\vec{z}, \vec{z}) \right) = 0. \quad (2.6)$$

Решение (2.5) с граничными условиями отсутствия падающего потока частиц позволяет найти распределение вылетающих из монокристалла электронов с учетом многократного некогерентного рассеяния и ионизационных потерь энергии.

### 3. Эффекты дифракции в угловом распределении рассеянных электронов. Прохождение сквозь монокристалл

В пренебрежении дифракцией некогерентного поля возникающий вследствие многократного рассеяния широкий диффузный фон во многом подобен угловому распределению частиц в аморфном веществе. От направления падения начального потока фон (2.5) зависит через матричные элементы когерентного поля  $W_{eh}(\vec{z}, \vec{z})$ . Для кристалла, толщина которого превышает длину аномального прохождения, ориентационная зависимость углового распределения некогерентно рассеянных электронов исчезает [18].

Учет влияния регулярного потенциала в уравнениях для некогерентного поля приводит к возникновению тонкой дифракционной структуры на широком фоне многократного рассеяния. Процессы дифракции приводят не только к перебросу части фона из областей с большей интенсивностью в области с меньшей интенсивностью (появление так называемых Кикучи-линий), но и изменяет сам характер некогерентного рассеяния вблизи условия Брэгга. Последний эффект проявляется для достаточно толстых кристаллов в виде образования Кикучи-полос, параллельных системам кристаллографических плоскостей [1-2].

Вследствие условия (2.4) при нахождении тонкой дифракционной структуры некогерентного фона можно в (1.13) пренебречь интегральными слагаемыми, описывающими возвращение частиц из соседних состояний в данное при многократном рассеянии. Тогда уравнения для расчета деформации фона вблизи брэгговских направлений будут совпадать с (2.2). Для электронов с энергией порядка нескольких десятков килоэлектронвольт при выполнении условия "слабой связи" [25]

$$\frac{G^2}{2m |\Lambda(\vec{G})|} \gg 1 \quad (3.1)$$

можно воспользоваться двухволновым приближением динамической теории дифракции. Учитывая в (2.2) один вектор обратной решетки и обозначая

$$\varphi(\vec{p}, \vec{z}) = W(\vec{p}, \vec{p}; \vec{z}, \vec{z}) - C(\vec{p}, \vec{z});$$

$$\chi(\vec{p} + \vec{G}, \vec{z}) = W(\vec{p} + \vec{G}, \vec{p} + \vec{G}; \vec{z}, \vec{z}) - C(\vec{p} + \vec{G}, \vec{z});$$

$$\alpha(\vec{z}) = \beta^*(\vec{z}) = W(\vec{p} + \vec{G}, \vec{p}; \vec{z}, \vec{z}),$$

для плоскопараллельной монокристаллической пластины получим систему четырех уравнений для распределения интенсивности тонкой структуры

$$\mu v \frac{\partial}{\partial z} \varphi = -\Gamma \varphi + i \Lambda (\beta - \alpha) - \delta/2 (\alpha + \beta); \quad (3.2)$$

$$\mu v \frac{\partial}{\partial z} \chi = -\Gamma \chi + i \Lambda (\alpha - \beta) - \delta/2 (\alpha + \beta); \quad (3.3)$$

$$\mu v \frac{\partial}{\partial z} \alpha + i E \alpha = -\Gamma \alpha + i \Lambda (\chi - \varphi) - \delta/2 (\chi + \varphi) + Q(\vec{p}, z); \quad (3.4)$$

$$\mu v \frac{\partial}{\partial z} \beta - i E \beta = -\Gamma \beta + i \Lambda (\varphi - \chi) - \delta/2 (\varphi + \chi) + Q^*(\vec{p}, z) \quad (3.5)$$

с граничным условием при  $z = 0$

$$\varphi(0) = \chi(0) = \alpha(0) = \beta(0) = 0. \quad (3.6)$$

При написании системы (3.2)–(3.5) учтена возможность применения малоуглового приближения (2.4), а параметры дифракционного рассеяния  $\Gamma = \gamma_{00}$ ;  $\gamma = \gamma_{10} = \gamma_{01}$ ;  $\Lambda = \Lambda_{10} = \Lambda_{01}$  предполагались вещественными. В уравнениях (3.2)–(3.5)  $\mu = \cos \phi > 0$ , где  $\phi$  – угол наклона отражающей системы кристаллографических плоскостей к оси  $Z$ . В дальнейшем будет рассматриваться случай близкого к нормальному падению электронов на поверхность кристалла и  $\mu \cong 1$ . Параметр  $E = \varepsilon_{\vec{p}+\vec{G}} - \varepsilon_{\vec{p}}$  задает отклонение направления  $\vec{p}$  от точного условия Брэгга. В дальнейшем удобно ввести относительное энергетическое отклонение  $y = E/2\Lambda$ .

Функция  $Q(\vec{p}, z)$ , возникающая при подстановке  $C(\vec{p}, z)$  в уравнения для недиагональных элементов (1.13) с учетом большого углового масштаба распределения  $C(\vec{p}, z)$   $\Delta p \sim \kappa \approx G$  определяется выражением

$$Q(\vec{p}, z) = v \frac{\partial}{\partial z} C(\vec{p}, z) + i\Lambda (C(\vec{p}+\vec{G}, z) - C(\vec{p}, z)). \quad (3.7)$$

Решение (3.2)–(3.5) с начальным условием (3.6) можно найти преобразованием Лапласа для обычно имеющего место случая [5]

$$|\chi| \ll |\Lambda|:$$

$$\varphi(\vec{p}, z) = \varphi_{\Lambda}(\vec{p}, z) + \varphi_{\Pi}(\vec{p}, z);$$

$$\varphi_{\Lambda}(\vec{p}, z) = \int_0^{z/v} d\tau \exp(-\Gamma\tau) [C(\vec{p}+\vec{G}, z-v\tau) - C(\vec{p}, z-v\tau)]. \quad (3.8)$$

$$\times \left\{ \frac{\Lambda}{\sqrt{1+y^2}} \sin(2\Lambda\sqrt{1+y^2}\tau) - \frac{\chi}{2} \frac{y}{1+y^2} \left[ \left( \operatorname{ch}\left(\frac{\chi\tau}{\sqrt{1+y^2}}\right) - \cos(2\Lambda\sqrt{1+y^2}\tau) \right) + \frac{y}{1+y^2} \operatorname{sh}\left(\frac{\chi\tau}{\sqrt{1+y^2}}\right) \right] \right\};$$

$$\varphi_{\Pi}(\vec{p}, z) = \int_0^{z/v} d\tau \left( -v \frac{\partial}{\partial z} C(\vec{p}, z) \right) \Big|_{z-v\tau} \exp(-\Gamma\tau).$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+y^2}} \operatorname{sh}\left(\frac{\chi\tau}{\sqrt{1+y^2}}\right) + \frac{y}{1+y^2} \left[ \operatorname{ch}\left(\frac{\chi\tau}{\sqrt{1+y^2}}\right) - \cos(2\Lambda\sqrt{1+y^2}\tau) \right] \right\}. \quad (3.9)$$

Распределение интенсивности тонкой структуры вблизи направления отражения  $\chi(\vec{p} + \vec{G}, z)$  определяется выражениями, аналогичными (3.8)–(3.9), но в которых переставлены местами  $\vec{p}$  и  $\vec{p} + \vec{G}$ .

Как непосредственно видно из (3.8)–(3.9), слагаемое  $\varphi_\wedge(\vec{p}, z)$  появляется при наличии разности интенсивностей диффузного фона в направлениях  $\vec{p}$  и  $\vec{p} + \vec{G}$  и описывает возникающую в этих условиях пару Кикучи–линий. Второе слагаемое (3.9) отлично от нуля при одинаковой величине фона в направлениях  $\vec{p}$  и  $\vec{p} + \vec{G}$  и описывает Кикучи–полосу. Рассчитанный по формуле (3.9) контраст распределения интенсивности в Кикучи–полосе (220) германия

$$K(\vec{p}, z) = \varphi(\vec{p}, z) / C(\vec{p}, z) \quad (3.10)$$

для различных толщин монокристалла приведен на рис. 1 и 2.

Для численного расчета некогерентный фон оценивался в диффузионном приближении по поперечному импульсу [26]. Величина параметров дифракционного отражения  $\Gamma$ ,  $\gamma$ ,  $\wedge$  выбрана в соответствии с экспериментальными данными [6] для электронов с энергией 100 кэВ. Толщина кристалла в первом случае равнялась 400 А, во втором 2000 А.

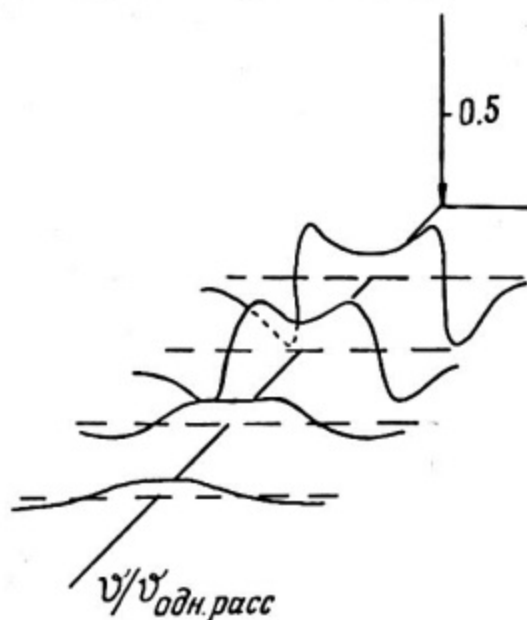


Рис. 1.

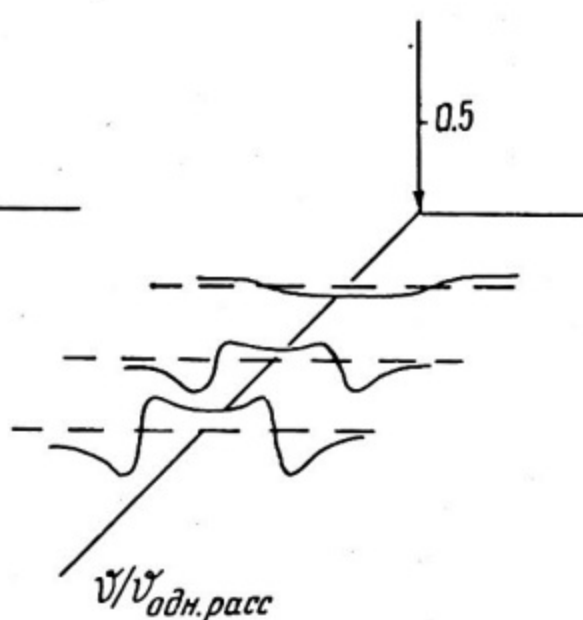


Рис. 2.

Формула (3.9) и рис. 1 и 2 позволяют дать простую интерпретацию эффекту обращения контраста Кикучи–полос с увеличением толщины кристалла [27].

Процесс рассеяния в кристалле отличается от ситуации в аморф-

ной среде наличием блоховских состояний различного типа, испытывающих усиленное или ослабленное неупругое взаимодействие с атомами вещества [28, 29]. Для качественного анализа углового распределения электронов учтем, что в области энергий, меньших нескольких мегаэлектронвольт, приход и уход частиц из блоховских состояний в состояния типа плоских волн, существующие вдали от направлений плотной упаковки, происходит за счет однократного некогерентного рассеяния. Тогда при изменении интенсивности фона числа заполнения состояний, в которых электроны слабо взаимодействуют с атомами, будут "отставать" от среднего уровня, а заселенность состояний, локализованных на атомных плоскостях и испытывающих сильное неупругое рассеяние, наоборот, будет опережать этот уровень. Например, в центральной области электронограммы (см. рис. 2) уровень фона уменьшается:  $\frac{\partial}{\partial z} C(\vec{p}, z) < 0$ . Очевидно, что при этом наименьшей будет заселенность блоховского состояния, локализованного на атомах кристалла и дающего на электронограмме вклад во внутреннюю область Кикучи-полосы. Число заполнения состояний, локализованного в межатомном пространстве и "отстающего" от общего убывания фона, напротив, превосходит среднее значение. Этим вызвано увеличение интенсивности к краям полосы.

Поскольку в области больших углов отклонения от направления падающего пучка фон возрастает с увеличением толщины кристалла  $\frac{\partial}{\partial z} C(\vec{p}, z) > 0$ , здесь картина заселенности блоховских состояний различного типа противоположна обсуждавшейся выше. Это приводит к взаимно обратному контрасту Кикучи-полос в области малых и больших углов рассеяния. Экспериментально подобные эффекты наблюдались в [30].

#### 4. Ориентационная зависимость ионизационных потерь энергии электронов в тонком кристалле

Для вычисления энергетического спектра электронов, возникающего вследствие ионизации атомов кристалла, необходима лишь функция распределения неупруго рассеянных частиц

$$D(E, \vec{z}) = \int d^3\rho \delta(E - \varepsilon_{\vec{p}}) C(\vec{p}, \vec{z}), \quad (4.1)$$

поскольку когерентное поле дает вклад лишь в пик упругого рассеяния при  $E = \varepsilon_{\vec{p}}$ . Тогда, интегрируя (2.5) в малоугловом приближении при близком к нормальному падении начального потока электронов на поверхность кристалла, можно получить уравнение для определения энергетического спектра (4.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{D}(E, z) &= \sum_j W_j(E + E_j; E) \mathcal{D}(E + E_j, z) - \\ &- \sum_j W_j(E, E - E_j) \mathcal{D}(E, z) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l, h} (W_{hl}^h(E) + W_{hl}^l(E)) W_{eh}(z), \end{aligned} \quad (4.2)$$

где

$$W_j(\varepsilon_{\vec{p}}; E) = \frac{1}{v} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^2} \sigma_j(-\vec{q}, \vec{q}) \delta(\varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - E);$$

$$W_{hl}^h(E) = \frac{1}{v} \sum_j \int \frac{d^3p}{(2\pi)^2} \sigma_j(\vec{p} + \vec{G}_h - \vec{p}, \vec{p} - \vec{p} - \vec{G}_e) \times$$

$$\times \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - E) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} + E_{j_0} - \varepsilon_h).$$

Поскольку в тонком слое кристалла быстрые электроны теряют лишь незначительную часть своей энергии, для решения (4.2) можно воспользоваться приближением [26] малости переданной энергии по сравнению с  $\varepsilon_{\vec{p}}$ . Тогда, переходя в (4.2) от суммирования по квантовым числам возбужденных состояний атомов к интегрированию по энергиям возбуждений и обозначая

$$\mathcal{D}(\varepsilon_{\vec{p}} - \Delta, z) \equiv \mathcal{D}(\Delta, z),$$

можно получить уравнение потерь энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{D}(\Delta, z) &= \int_0^{\Delta} d\varepsilon \omega(\varepsilon) \mathcal{D}(\Delta - \varepsilon, z) - \int_0^{\infty} d\varepsilon \omega(\varepsilon) \mathcal{D}(\Delta, z) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{h, l} (W_{hl}^h(\Delta) + W_{hl}^l(\Delta)) W_{eh}(z), \end{aligned} \quad (4.3)$$

где

$$\omega(\varepsilon) = \sum_j W_j(\varepsilon_{\vec{p}} - \Delta + \varepsilon, \varepsilon - \Delta) \delta(\varepsilon - E_j);$$

$$W_{eh}^l(\varepsilon) = W_{eh}^l(\varepsilon_{\vec{p}} - \Delta).$$

Решение (4.3), которое можно найти преобразованием Лапласа, имеет вид:

$$\mathcal{D}(\Delta, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+A}^{i\infty+A} ds \exp(s\Delta) d(s, z);$$

$$d(s, z) = \int_0^z d\tau \exp(-V(s)(z-\tau)) \times$$

$$\times \frac{1}{2} \sum_{h, l} (\omega_{hl}^h(s) + \omega_{hl}^l(s)) W_{eh}(\tau);$$

$$V(s) = \int_0^\infty d\varepsilon \omega(\varepsilon) (1 - \exp(-\varepsilon s)).$$
(4.4)

Формула (4.4) дает в пренебрежении дифракцией некогерентного фона энергетическое распределение потока быстрых электронов, прошедших по нормали к поверхности расстояние  $z$  в глубину монокристалла.

Поскольку в тонком слое происходит всего несколько неупругих столкновений, (4.4) трудно аппроксимировать простой аналитической зависимостью. Однако влияние начальной ориентации пучка на характер ионизационных потерь можно определить с помощью моментов энергетического распределения (4.4), в частности, средней энергии, теряемой электронами на глубине  $z$ ,

$$\langle \Delta(z) \rangle = \int_0^\infty \Delta \mathcal{D}(\Delta, z) d\Delta; \quad (4.5)$$

$$\langle J(z) \rangle = \langle \varepsilon \rangle z + \frac{1}{2} \sum_{\substack{h, l \\ h \neq l}} \int_0^z d\tau W_{hl}(\tau) (\langle \varepsilon_{eh}^l \rangle + \langle \varepsilon_{eh}^h \rangle), \quad (4.6)$$

где  $\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon_{\infty}^0 \rangle$ ;  $\langle \varepsilon_{eh}^l \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon \omega_{eh}^l(\varepsilon)$ .

Как следует из (4.6), средние потери энергии, а с ними и все энергетическое распределение сильно отличаются от случая аморфной среды, если имеют заметную величину недиагональные элементы когерентной системы (2.2), т.е. когда возбуждены одно или

несколько брэгговских отражений. Случаю отражения на один вектор обратной решетки соответствует двухволновое приближение динамической теории, при котором в (4.6) учитываются лишь матричные элементы с  $l, h = 0, I$ . Решение (2.2) в этом приближении имеет вид

$$W_{00} = \frac{1}{2(1+y^2)} e^{-\Gamma s} \left\{ \cos(2|\Lambda|\sqrt{1+y^2}s) + (1+2y^2) \operatorname{ch}\left(\frac{|\chi|\cos\theta}{\sqrt{1+y^2}}s\right) - 2y\sqrt{1+y^2} \operatorname{sh}\left(\frac{|\chi|\cos\theta}{\sqrt{1+y^2}}s\right) \right\}; \quad (4.7)$$

$$W_{11} = \frac{1}{2(1+y^2)} e^{-\Gamma s} \left\{ \operatorname{ch}\left(\frac{|\chi|\cos\theta}{\sqrt{1+y^2}}s\right) - \cos(2|\Lambda|\sqrt{1+y^2}s) \right\}; \quad (4.8)$$

$$W_{10} = W_{01}^* = -\frac{1}{2} e^{i\theta_\Lambda} e^{-\Gamma s} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+y^2}} \operatorname{sh}\left(\frac{|\chi|\cos\theta}{\sqrt{1+y^2}}s\right) - \frac{y}{1+y^2} \left[ \operatorname{ch}\left(\frac{|\chi|\cos\theta}{\sqrt{1+y^2}}s\right) - \cos(2|\Lambda|\sqrt{1+y^2}s) \right] + \frac{i}{\sqrt{1+y^2}} \sin(2|\Lambda|\sqrt{1+y^2}s) \right\}; \quad (4.9)$$

где  $\xi = z/v$  ;  $\Lambda_{10} = |\Lambda| \exp(i\theta_\Lambda)$  ;

$\Gamma = \gamma_{00}$  ;  $\chi_{10} = |\chi| \exp(i\theta_\chi)$  ;

$y = (\epsilon_0 - \epsilon_1)/2|\Lambda|$  ;  $\theta = \theta_\Lambda - \theta_\chi$ .

Подстановка (4.9) в (4.6) позволяет получить простое, хотя и громоздкое аналитическое выражение для средней потерь энергии  $\langle \Delta(z) \rangle$  в условиях двухволновой дифракции падающих электронов. Величиной, характеризующей отличие ионизационных потерь в кристалле от случая аморфной среды, является относительная разность потерь

$$I(z) = \frac{\langle \Delta(z) \rangle - \langle \epsilon \rangle z}{\langle \epsilon \rangle z}. \quad (4.10)$$

Графики зависимости (4.10) от глубины проникновения в кристалл приведены на рис. 3, 4. Параметры  $\Gamma$ ,  $\chi$ ,  $\Lambda$  соответствуют отражению (220) германия [6] и предполагаются вещественными. Рис. 3 выполнен для начальной энергии электронов 5 кэВ, рис.

4 - 100 кэВ. На каждом из графиков указано значение параметра отклонения  $\gamma$  начального пучка от точного брегговского условия ( $\langle \varepsilon_{10} \rangle = \langle \varepsilon_{00} \rangle$ ).

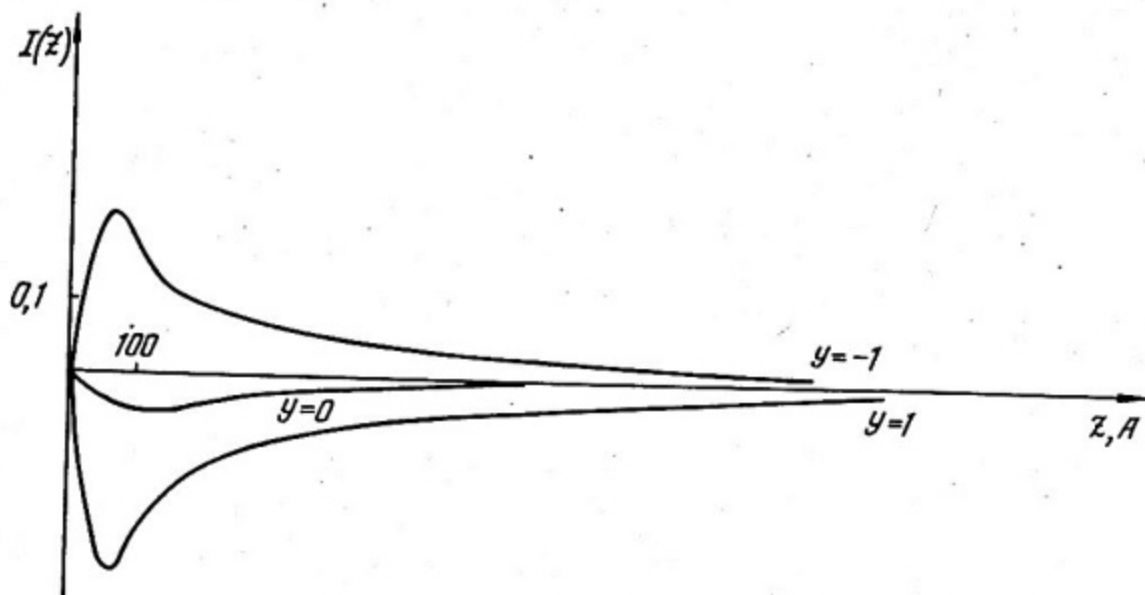


Рис. 3.

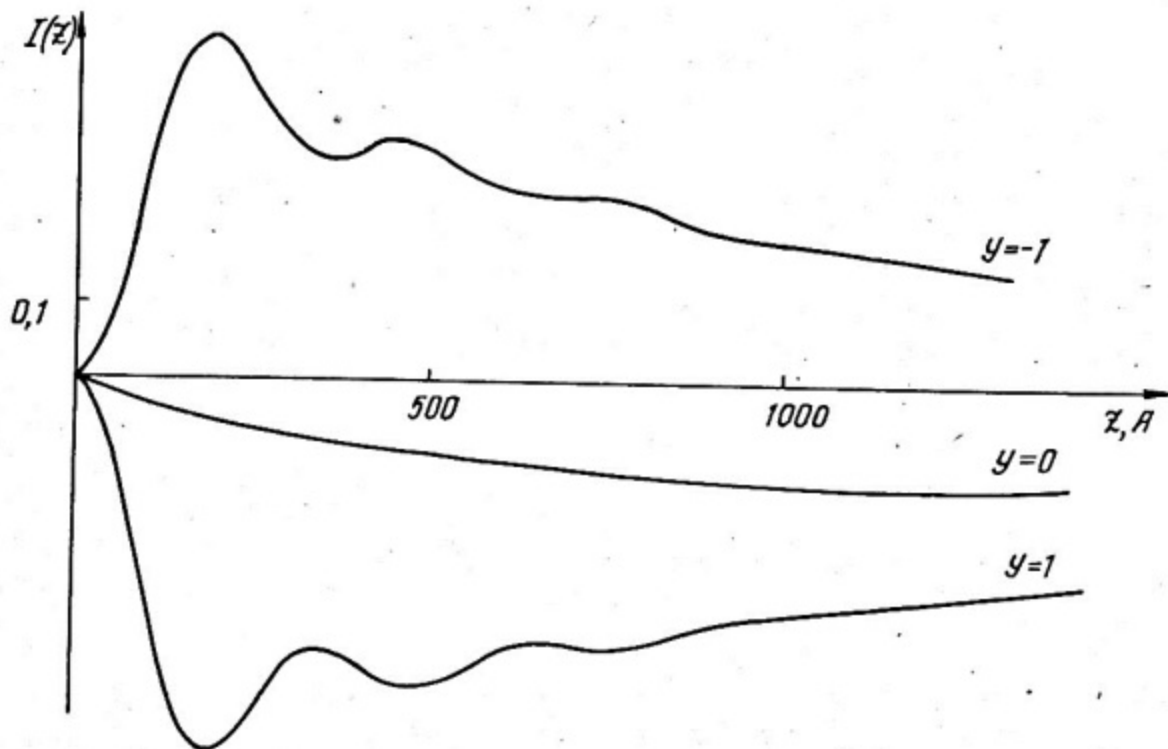


Рис. 4.

Согласно рис. 3 и 4 все ориентационные эффекты сосредоточены в тонком (порядка нескольких сотен ангстрем) приповерхностном слое кристалла, причем значениям  $\psi > 0$ , при которых угол падения первичных электронов на атомные плоскости  $\vartheta$  превышает брэгговский, соответствуют меньшие, чем в аморфной среде, ионизационные потери энергии. С другой стороны, электроны, падающие вдоль плоскостей кристалла ( $\psi < 0$ ), испытывают более сильное неупругое рассеяние. Такая ориентационная зависимость ионизационных процессов связана с картиной заселенности блоховских состояний поперечного движения [1, 28], возникающих при дифракции в кристалле. Действительно, при падении электронов вдоль кристаллографических плоскостей в основном заполняются состояния с меньшей энергией поперечного движения, локализованные на атомах решетки. Выход неупругих процессов при этом увеличивается. При  $\vartheta > \vartheta_B$ , наоборот, падающие частицы в основном заселяют состояния, расположенные между атомными плоскостями и слабо взаимодействуют с электронами внутренних оболочек, что приводит к подавлению процессов ионизации.

Другой нетривиальной особенностью энергетических потерь в кристалле является наличие экстремумов у функции  $I(x)$ . Их появление связано с конкуренцией между когерентным брэгговским и некогерентным (тепловым и ионизационным) типами рассеяния. На малых глубинах преобладает брэгговская дифракция быстрых электронов, сильно зависящая от начальной ориентации пучка. Однако на больших глубинах частицы выходят из каналов когерентного рассеяния и ориентационная зависимость исчезает. Появление осцилляций функции  $I(x)$  в случае больших энергий падающих электронов (рис. 4) также связано с соотношениями между параметрами когерентного и некогерентного рассеяния. Из (2.2) нетрудно получить, что

$$\frac{|\Lambda|}{r} \sim \frac{|\Lambda|}{|x|} \sim \nu,$$

т.е. при увеличении энергии электронов относительная интенсивность брэгговского рассеяния возрастает.

Результаты данного раздела могут быть использованы для анализа процессов генерации вторичных электронов и характеристического рентгеновского излучения, которые в настоящее время широко исследуются экспериментально [15, 31-33].

## 5. Эффекты дифракции в угловом распределении рассеянных электронов. Отражение от монокристалла

Решение уравнения (2.5) с граничным условием отсутствия падающего потока позволяет найти импульсное распределение электронов, отраженных от монокристалла при многократном некогерентном рассеянии. Аналитических методов решения такой задачи в настоящее время не найдено, и количественные результаты требуют численного расчета [17]. Однако тонкая дифракционная структура Кикучи-линий на фоне углового распределения отраженных частиц, известная как картины обратного рассеяния электронов [34], может быть найдена методом, аналогичным (3.1)–(3.9). Рассмотрим случай отражения от полубесконечного кристалла. Сохраняя обозначения п. 3, для деформации фона вблизи брэгговского направления можно получить уравнения, совпадающие с (3.2)–(3.5), но с граничным условием

$$\varphi(\infty) = \chi(\infty) = \alpha(\infty) = \beta(\infty) = 0. \quad (5.1)$$

При этом угол между направлением движения электронов и осью  $\tilde{z}$  порядка  $\pi$  и, следовательно,  $\mu \approx -1$ . Функция  $Q(\vec{r}, z)$  выражается через решение (2.5) как

$$Q(\vec{r}, z) = \mu v \frac{\partial}{\partial z} C(\vec{r}, z). \quad (5.2)$$

Решение задачи (3.2)–(3.5), (5.1)–(5.2) может быть найдено преобразованием Лапласа

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}, 0) = & - \int_0^{\infty} dx \mu v \left. \frac{\partial C(\vec{r}, z)}{\partial z} \right|_{zv} e^{-\Gamma x} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+y^2}} \operatorname{sh} \left( \frac{\gamma x}{\sqrt{1+y^2}} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\gamma}{1+y^2} \left[ \operatorname{ch} \left( \frac{\gamma x}{\sqrt{1+y^2}} \right) - \cos(2\lambda \sqrt{1+y^2} x) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Выражение для  $\chi(\vec{r} + \vec{G}, 0)$  отличается от (5.3) изменением знака  $\gamma$ .

Характерной длиной изменения  $C(\vec{r}, z)$  является транспортная длина  $l_{tr} \gg v/\Gamma$  [35]. Тогда (5.3) можно вычислить в явной форме

$$\varphi(\vec{r}, 0) \approx \mu \frac{v}{\Gamma} \left. \frac{\partial}{\partial z} C(\vec{r}, z) \right|_{z=+0} J(\gamma), \quad (5.4)$$

где универсальная функция  $J(y)$  имеет вид:

$$J(y) = \frac{y}{1+y^2} \frac{1}{1 + \left(\frac{2\Lambda}{r}\right)^2 (1+y^2)} - \frac{y + \delta/r}{(1+y^2) - \delta^2/r^2}. \quad (5.5)$$

Для определения контраста Кикучи-полосы, возникающей на фото-пластинке вблизи брэгговского направления, необходимо (5.4) проинтегрировать по абсолютной величине  $\rho$  при фиксированном направлении наблюдения  $\vec{e}$ . При этом необходимо учитывать, что угол Брэгга  $\vartheta_B = G/\rho$  зависит от абсолютной величины импульса. Поэтому уширение энергетического спектра отраженных частиц при увеличении толщины кристалла будет приводить к ухудшению контраста картин обратного рассеяния (см. [4]).

Учитывая, что спектр отраженных электронов имеет максимум вблизи начальной энергии, контраст полосы, подобный (3.10), можно вычислить в явном виде

$$K(y) = \mu \frac{v}{r} \frac{\partial}{\partial z} \ln (C(\vec{e}, z)) \Big|_{z=+0} J(y). \quad (5.6)$$

Выражение для логарифмической производной среднего фона при близком к нормальному падении потока электронов на поверхность кристалла нетрудно получить методом, развитым в [35]:

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \ln (C(\vec{e}, z)) \Big|_{z=+0} = \frac{2}{l_{tr}} \cdot \frac{1+\sigma}{\sigma}, \quad (5.7)$$

$$\frac{H\left(1, \frac{\sigma}{1+\sigma}\right) - \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{H(|\mu|, \frac{\sigma}{1+\sigma}) H\left(1, \frac{\sigma}{1+\sigma}\right)}{1+|\mu|} \right]}{\frac{1}{1+|\mu|} H(|\mu|, \frac{\sigma}{1+\sigma}) H\left(1, \frac{\sigma}{1+\sigma}\right)}$$

где параметр  $\sigma$  равен отношению пробега электронов в кристалле к транспортной длине;  $H(\mu, \lambda)$  - функция Чандрасекара [36].

Рассчитанный по формуле (5.6) контраст углового распределения электронов с энергией 20 кэВ вблизи брэгговского направления (220) меди приведен на рисунке 5. Параметры отражения  $\Gamma$ ,  $\delta$ ,  $\Lambda$  взяты из [37], сечения рассеяния оценивались в модели Эйнштейна теплового движения атомов [18],  $\mu = -1$ .

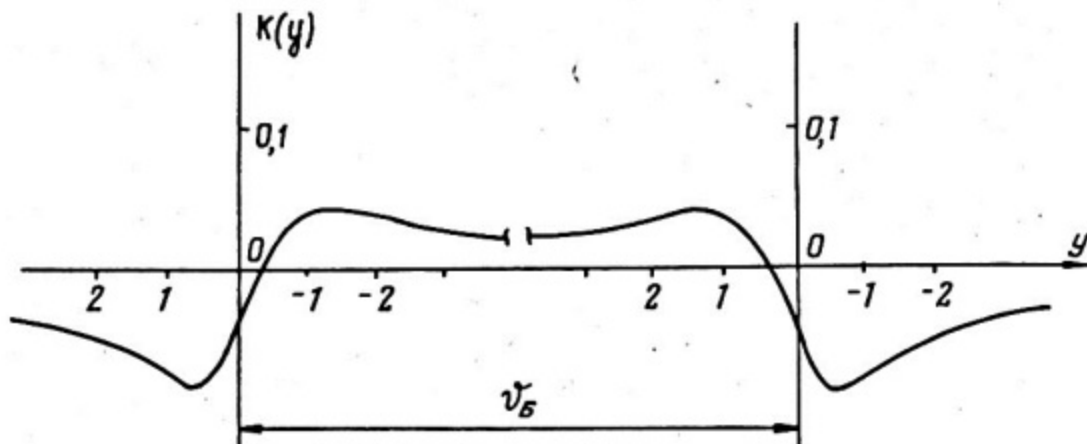


Рис. 5.

Изображенная на рис. 5 форма Кикучи-полосы находится в качественном согласии с наблюдениями [4, 34]. К сожалению, отсутствие подробного экспериментального анализа картин обратного рассеяния не позволяет произвести количественное сравнение с (5.6).

## 6. Заключение

В данной работе в локально-эйконоальном приближении построено стационарное квантовое кинетическое уравнение (1.13), которое учитывает как когерентную дифракцию на регулярном расположении атомов в динамической теории, так и многократное некогерентное (в том числе тепловое и ионизационное) рассеяние. Найдены приближенные аналитические методы решения этого уравнения для быстрых электронов с энергией 10–100 кэВ. Рассчитаны распределения интенсивности Кикучи-линий и полос при прохождении и отражении от монокристаллов (3.9) и (5.4). Отмечено соответствие этих результатов экспериментальным данным [4, 30, 34]. Получено аналитическое выражение для энергетического спектра быстрых электронов в тонком кристалле (4.4). Проведен анализ ориентационной зависимости потерь энергии, что представляет интерес в связи с экспериментами по генерации вторичных электронов и рентгеновского излучения в кристаллических средах [15, 31–33].

## Литература

1. Хирш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М.Дж. Электронная микроскопия тонких кристаллов. - М.: Мир, 1968.
2. Томас Г., Гориндж М.Дж. Просвечивающая электронная микроскопия материалов. - М.: Наука, 1983.
3. Humphreys C.J. The scattering of fast electrons by crystals. - Rep. Prog. Phys., 1979, v.42, No II, 1825-1887.
4. Neidrig H. Electron backscattering from thin films. - Journ. Appl. Phys., 1982, v.53, No 4, R15 - R49.
5. Radi G. Complex lattice potentials in electron diffraction calculated for a number of crystals. - Acta Cryst. A, 1970, 26, No I, 41.
6. Kamiya Y., Nakai Y., Masuda E. Absorption coefficients of electrons in crystals. - Acta Cryst. A, 1981, v.37, NO 3, 485-488.
7. Алексанян Л.А., Пинскер З.Г., Чуховский Ф.Н. Теория образования Кикучи-электронограмм. - Кристаллография, 1972, т. 17, № 6, с. III7-III4.
8. Chukhovskii F.N., Alexanjan L.A., Pinsker Z.G. Dynamical treatment of Kikuchi patterns. - Acta Cryst. A, 1973, v.29, No I, 38-45.
9. Hoier R. Multiple scattering and dynamical effects in diffuse electron scattering. - Acta Cryst. A, 1973, v.29, No 5, 663 - 672.
10. Rez P., Humphreys C.J., Whelan M.J. The distribution of intensity in electron diffraction patterns due to phonon scattering. - Phil. Mag., 1977, v.35, No I, 81 - 96.
11. Serneels R., Van Roost C., Knuit G. Kikuchi patterns in transmission electron diffraction. - Phil. Mag. A, 1982, v.45, No 4, 677-684.
12. Мигдал А.Б. Квантовое кинетическое уравнение для многократного рассеяния. - Докл. АН СССР, 1955, т. 105, № 1, с. 77-79.
13. Мигдал А.Б., Полиевктов-Николадзе Н.М. Квантовое кинетическое уравнение для парных соударений. - Докл. АН СССР, 1955, т. 105, № 2, с. 233-235.
14. Каган Ю., Кононец Ю.В. Теория эффекта каналирования. - ЖЭТФ, 1970, т. 58, № 1, 226-244; ЖЭТФ, 1973, т. 64, № 3, с. 1042-1064; ЖЭТФ, 1974, т. 66, № 5, с. 1693-1711.

15. Tafto J. Channeling effect in electron induced X-ray emission from diatomic crystals. - Z.Naturforsch.A, 1979 , v.34, No 4, 452 - 458.

16. Bird D.M., Buxton B.F. A transport theory for multiple thermal diffuse scattering including dynamical diffraction. - in "Electron microscopy" , proc. VII European Congress. Leiden, 1980 , v.I , 142 - 143.

17. Spenser J.P., Humphreys C.J. A multiple scattering transport theory for electron channeling patterns. - Phil.Mag.A , 1980, v.42 , No 4 , 433 - 451.

18. Дударев С.Л., Рязанов М.И. Взаимное влияние двухволновой дифракции и некогерентного рассеяния заряженной частицы в монокристалле. - ЖЭТФ, 1983, т. 85, № 5, 1748-1756.

19. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. - М.: Мир, 1983, гл. 7.

20. Afanas'ev A.M., Kagan Yu. The role of lattice vibrations in dynamical theory of X-rays. - Acta Cryst.A, 1967, v.24, No 2, 163 - 170.

21. Yoshioka H. Effect of inelastic waves on electron diffraction. - Journ.Phys.Soc.Japan, 1957 , v.12 , No 6, 618 - 628.

22. Maslen V.W., Rossouw C.J. The inelastic scattering matrix element and its application to electron energy loss spectroscopy. - Phil.Mag. A, 1983 , v.47 , No 1, 119 - 130.

23. Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. - М.: Мир, 1981, т. 2, с. 13.

24. Подсвиров О.А., Титов А.И., Макаров В.В. Измерение толщины аморфных и кристаллических слоев с помощью обратного рассеяния электронов. - Поверхность, 1982, № 11, 87-93.

25. Fujimoto F., Takagi S., Komaki K., Koike H., Uchida Y. The reciprocity of electron diffraction and electron channeling. Rad.Effects, 1972, v.12 , No 2 , 153 - 161.

26. Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. - М.: Атомиздат, 1980, с. 28.

27. Дударев С.Л., Рязанов М.И. Ориентационные эффекты в угловом распределении вылетающих из толстого монокристалла частиц. -

В сб.: Тезисы докладов XIV Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. - М.: МГУ, 1984, с. 7.

28. Hashimoto H., Howie A., Whelan M.J. Anomalous electron absorption effects in metal foils : theory and comparison with experiment. - Proc. Roy. Soc. A, 1962, v. 269, No 1336, 80 - 106.

29. Каган Ю., Бабаханян Э.А., Кононец Ю.В. Особая роль надбарьерных состояний в картине каналирования электронов в кристаллах. - Письма в ЖЭТФ, 1980, т. 31, № 12, 776-780.

30. Nakai Y. Excess and defect Kikuchi bands in electron diffraction patterns. - Acta Cryst. A, 1970, v. 26, No 4, 459-460.

31. Кораблев В.В., Румянцев В.В., Дубов В.В. Ориентационный эффект при эмиссии Оже-Электронов различных энергий из монокристаллов. - ФТТ, 1983, т. 25, № 12, 3527-3531.

32. Taftø J. The cation-atom distribution in a  $(Cr, Fe, Al, Mg)_3O_4$  spinel as revealed from the channeling effect in electron-induced X-ray emission. - J. Applied Cryst., 1982, v. 15, No 4, 378 - 381.

33. Taftø J., Spence J.C.H. Atomic site determination using the channeling effect in electron-induced X-ray emission. - Ultramicroscopy, 1982, v. 9, No 3, 243 - 248.

34. Harland C.J., Akhter P., Venables J.A. Accurate microcrystallography at high spatial resolution using electron back-scattering patterns in a field emission gun scanning electron microscope. - J. Phys. E, 1981, v. 14, No 2, 175 - 182.

35. Тилинин И.С. Отражение быстрых электронов при нормальном падении на поверхность вещества. - ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 4, 1291-1305.

36. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. - М.: ИЛ, 1953, гл. 3.

37. Reimer L., Wächter M. Complex Fourier coefficients of the crystal lattice potential. - in "Electron Microscopy", Proc. VII European Congress. Leiden, 1980, v. 3, 192 - 193.

## Оглавление

Введение .....	3
1. Квантовое кинетическое уравнение в локально-эйкональном приближении .....	4
2. Когерентное и некогерентное волновое поле .....	10
3. Эффекты дифракции в угловом распределении рассеянных электронов. Прохождение сквозь монокристалл .....	12
4. Ориентационная зависимость ионизационных потерь энергии электронов в тонком кристалле .....	16
5. Эффекты дифракции в угловом распределении рассеянных электронов. Отражение от монокристалла .....	22
6. Заключение .....	24

Сергей Львович Дударев  
Михаил Иванович Рязанов

Интерференционные явления при когерентном и некогерентном рассеянии заряженных частиц в монокристалле

Рукопись поступила в издательский отдел 6.07.84.

Ответственный за выпуск В.П.Протасов

---

Л.-83378	Подписано в печать 2/х-1984г.	формат 60 x 84 I/I6
П.л. 1,75	Уч.-изд.л. 1,75	Тираж 160 экз.
изд.№	, 006 - 84	Заказ 2388
		Цена 10 коп.

---

Типография МИФИ, Каширское шоссе, д. 31