Изв. АН Армянской ССР, Физика, 14, 247—252 (1979)

К ТЕОРИИ ОТРАЖЕНИЯ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ОТ ТОНКОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Э. С. ЮЗБАШЯН, З. А. КАСАМАНЯН

Рассматривается вопрос об отражении или дифракции медленных электронов в случае неприменимости теории возмущений. В предположении о наличии трансляционной инвариантности системы вдоль плоских границ пленки, но в отсутствие разделения переменных для кристаллического потенциала, в достаточно хорошем приближении задача сведена к квазиодномерной. Показано, что интенсивности дифракционных максимумов зависят также от условий сшивания на границах, что иллюстрируется на модели полупроводникового кристалла с узкой запрещенной зоной.

Исследование контактных задач методом функций Грина (ФГ) имеет ряд преимуществ по сравнению со стандартным методом волновых функций (ВФ) (см. обзор [1]). В частности, при исследовании дифракции медленных электронов (ДМЭ) от полубесконечного кристалла легко выявляется связь интенсивностей дифракционных максимумов с поверхностными электронными состояниями (ПЭС) [2, 3]. Поскольку положения последних чувствительно зависят от условий на границе (возможных искажений потенциала решетки вблизи поверхности, длины падения и формы потенциала поверхности и т. п. [4—7]), то эти факторы могут оказаться существенными и при исследовании ДМЭ. В связи с этим необходимо сформулировать задачу таким образом, чтобы иметь возможность варьировать граничные условия в широких пределах. Такая возможность сравнительно легко осуществляется в методе ФГ. Однако при этом необходимо иметь дело и с производными от ФГ при совпадающих координатах. С целью упрощения вычислений обычно выбираются такие граничные условия, когда эти производные исчезают. Между тем известные общие аналитические свойства как ФГ, так и их производных позволяют исследовать ПЭС [4, 7] и ДМЭ [3] в случае более общих граничных условий.

При падении медленных электронов на тонкий кристаллический образец дифракционные максимумы могут проявлять также зависимость от его толщины, что непосредственно связано с размерным квантованием в тонкой пленке. При построении общей теории ДМЭ необходимо учитывать как упругую часть, так и неупругую часть, связанную с электронными переходами внутри кристалла, с возбуждением поверхностных плазмонов и т. п. Тем не менее упруго отраженная часть является доминирующей при рассмотрении медленных электронов, а для нахождения неупругой части необходимо корректно вычислить ВФ упруго отраженных медленных электронов, когда теория возмущений становится неприменимой.

В настоящей работе развивается теория ДМЭ от тонких кристаллов, обобщаются результаты [3] на случай трех взаимодействующих подсистем.

Общий метод вычисления ФГ при взаимодействии произвольного числа подсистем развивается в [8], но для наших целей проще непосредственно построить ВФ двухконтактной задачи через ФГ отдельных подсистем.

Допустим, что плоскости $z = z_1$ и $z = z_2$ $(z_2 > z_1)$ являются границами раздела исследуемой системы II, на которую падает электрон из области $z < z_1$ (подсистема I). Для решения задачи необходимо записать ВФ, удовлетворяющие условиям сшивания, через ФГ трех подсистем $G_i (i = 1, 2, 3)$ и ВФ на границах.

Ниже исследование системы уравнений для ВФ и их производных проводится в случае, когда в подсистемах I и III (т. е. вне тонкой пленки) возможно разделение переменных, а именно, в любой плоскости, параллельной границам пленки, предполагается свободное движение с двумерным волновым вектором $\mathbf{k}$, но в перпендикулярном направлении одномерный потенциал считается произвольным. В области кристалла предполагается двумерная трансляционная инвариантность вдоль границ раздела. Кроме этого необходимо представить трехмерные ФГ G_1 и G_2 через соответствующие одномерные ФГ и учесть наличие разрыва у производных ФГ ($\hbar = 2 m_0 = 1$):

$$G' (\rho, z; \rho', z_i)\Big|_{z \to z_i \mp 0} = \mp \frac{1}{2} \delta (\rho - \rho') + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_i} G (\rho, z_i; \rho', z_i), \quad (1)$$

где $\mathbf{r} = \{\rho, z\}$, а штрих у функций означает производную по z_1 и z_2.

Это позволяет по аналогии с [3] записать БФ в следующем виде ($z_{-1} < z_1$, $\mathbf{k}_0$ — двумерный волновой вектор падающего электрона):

$$\psi (\rho, z) = e^{i\mathbf{k}_0\rho} G_1 (z, z_{-1}; E - E_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}_1} A_{\mathbf{k}_1} \frac{G_1' (z, z_1; E - E_{\mathbf{k}_1})}{G_1 (z_1, z_1; E - E_{\mathbf{k}_1})} e^{i\mathbf{k}_1\rho}, \quad z < z_1, \quad (2a)$$

$$\psi (\rho, z) = - G_1' (z_1 + 0, z_{-1}; E - E_{\mathbf{k}_0}) G_2 (\rho, z; \mathbf{k}_0, z_1) + $$
$$+ G_1 (z_1, z_{-1}; E - E_{\mathbf{k}_0}) G_2' (\rho, z; \mathbf{k}_0, z_1 - 0) - \quad (2б)$$
$$- \sum_{\mathbf{k}_1} A_{\mathbf{k}_1} \left[\frac{G_1' (z_1 - 0, z_1; E - E_{\mathbf{k}_1})}{G_1 (z_1, z_1; E - E_{\mathbf{k}_1})} G_2 (\rho, z; \mathbf{k}_1, z_1) - G_2' (\rho, z; \mathbf{k}_1, z_1 - 0) \right] +$$
$$+ \sum_{\mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_2} \left[\frac{G_3' (z_2 + 0, z_2; E - E_{\mathbf{k}_2})}{G_3 (z_2, z_2; E - E_{\mathbf{k}_2})} G_2 (\rho, z; \mathbf{k}_2, z_2) - G_2' (\rho, z; \mathbf{k}_2, z_2 + 0) \right],$$
$$z_1 < z < z_2,$$

$$\psi (\rho, z) = \sum_{\mathbf{k}_3} C_{\mathbf{k}_3} \frac{G_3' (z, z_2; E - E_{\mathbf{k}_3})}{G_3 (z_2, z_2; E - E_{\mathbf{k}_3})} e^{i\mathbf{k}_3\rho}, \quad z > z_2. \quad (2в)$$

Коэффициенты $A_{\mathbf{k}_1}$ и $C_{\mathbf{k}_3}$ определяются из дискретной системы неоднородных алгебраических уравнений, получаемой из (2) при замене $z \to z_1$ и $z \to z_2$ ($z_2 - z_1 = d$ — толщина пленки):

$$G_1 (z_1, z_{-1}; E - E_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{n}_0}) (J^-_{\mathbf{q}+\mathbf{n}, \mathbf{q}_0+\mathbf{n}_0} + \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_0} =$$
$$= \sum_{\mathbf{n}_1} A_{\mathbf{q}+\mathbf{n}_1} (- J^+_{\mathbf{q}+\mathbf{n}, \mathbf{q}+\mathbf{n}_1} + \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_1}) +$$

$$+\sum_{\mathbf{n}_1} C_{\mathbf{q}+\mathbf{n}_1}(-J^{+}_{\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}+\mathbf{n}_1}-\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_1})\,e^{iq_zd}\,, \tag{3а}$$

$$G_1(z_1,\ z_{-1};\ E-E_{\mathbf{q}_0+\mathbf{n}_0})\,(J^{-}_{\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}_0+\mathbf{n}_0}-\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0})=$$

$$=\sum_{\mathbf{n}_1} A_{\mathbf{q}+\mathbf{n}_1}(-J^{+}_{\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}+\mathbf{n}_1}+\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_1})+ \tag{3б}$$

$$+\sum_{\mathbf{n}_1} C_{\mathbf{q}+\mathbf{n}_1}(-J^{+}_{\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}+\mathbf{n}_1}-\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0})\,e^{-iq_zd}\,.$$

Здесь приняты во внимание условия симметричности границ

$$G_1(z_1,\ z_1)=G_3(z_2,\ z_2),\ G_1'(z_1,\ z_1)=-G_3'(z_2,\ z_2),$$
$$G_2(z_1,\ z_1)=G_2(z_2,\ z_2),\ G_2'(z_1,\ z_1)=-G_2'(z_2,\ z_2)$$

и введены обозначения

$$J^{\pm}_{\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}'+\mathbf{n}'}=[\pm1+G_1'(z_1,\,z_1;\,E-E_{\mathbf{q}'+\mathbf{n}'})]\,\frac{G_2^{\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}'+\mathbf{n}'}(z_1,\,z_1)}{G_1(z_1,\,z_1;\,E-E_{\mathbf{q}'+\mathbf{n}'})}-$$
$$-\,G_2'^{\,\mathbf{q}+\mathbf{n},\,\mathbf{q}'+\mathbf{n}'}(z_1,\ z_1), \tag{4}$$

где $G_2^{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z,z)$ — квазиодномерная ФГ [3], $\mathbf{k}=\mathbf{q}+\mathbf{n}$, $\mathbf{q}$ меняется в пределах первой двумерной зоны Бриллюэна, $\mathbf{n}$ — векторы двумерной обратной решетки.

Система уравнений (3) допускает точное решение, когда и в подсистеме II имеется разделение переменных.

В случае неразделяющихся переменных, как и в [3], здесь имеем ситуацию, когда основным является двухволновое приближение ($\mathbf{n}_1=\{0,0\}$). В этом случае амплитуды отражения в подсистему I и прохождения через подсистему II, задаваемые коэффициентами $A_{\mathbf{q}}$ и $C_{\mathbf{q}}$, имеют вид

$$A_{\mathbf{q}}=\frac{(J^-+1)(J^++1)\,e^{-iq_zd}-(J^--1)(J^+-1)\,e^{iq_zd}}{(J^+-1)(J^+-1)\,e^{iq_zd}-(J^++1)(J^++1)\,e^{-iq_zd}}\,G_1(z_1,\,z_{-1};\,E-E_{\mathbf{k}_0})\,\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_0}, \tag{5}$$

$$C_{\mathbf{q}}=\frac{(J^--1)(J^++1)-(J^-+1)(J^+-1)}{(J^+-1)(J^+-1)e^{iq_zd}-(J^++1)(J^++1)e^{-iq_zd}}\,G_1(z_1,\,z_{-1};\,E-E_{\mathbf{k}_0})\,\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_0}. \tag{6}$$

Методом последовательных приближений можно найти также выражения для величин $A_{\mathbf{q}+\mathbf{n}}$ и $C_{\mathbf{q}+\mathbf{n}}$ в многоволновом приближении ($\mathbf{n}_1\neq\{0,0\}$). Формулы (5) и (6) имеют такой же вид, что и в модельной одномерной теории [9]. Здесь вместо одномерных ФГ фигурируют квазиодномерные ФГ, зависящие от квазиволнового вектора $\mathbf{k}$ в качестве параметра.

Важным преимуществом полученных формул является то, что исходя из простой структуры и аналитических свойств квазиодномерных или поверхностных ФГ можно провести общее качественное рассмотрение без конкретизации кристаллического поля. Прежде всего, фигурирующие в (3), (4) квазиодномерные ФГ в рамках одночастичной постановки задачи являются действительными для запрещенных участков спектра и чисто мнимыми для разрешенных*. Далее, квазиодномерная ФГ $G^{kk}(z_0, z_0; E)$ имеет простые аналитические свойства: если внутри пленки потенциал является идеально периодическим, то при фиксированном значении $\mathbf{k}$ она является монотонной знакопеременной функцией энергии E в пределах каждой запрещенной зоны. На ее краях ФГ имеет, вообще говоря, корневую особенность типа $E^{-1/2}$, $E \to 0$, как в одномерной теории [4, 10]. Если принимать во внимание нарушение периодичности кристалла в направлении, перпендикулярном к плоскости пленки, то возникают дополнительные разрывные точки в пределах одной запрещенной зоны с сохранением вышеуказанных свойств ФГ между этими разрывными точками. Все эти вопросы непосредственно связаны с возникновением ПС на границах раздела пленки с внешней средой и проявляются в поведении коэффициентов отражения и прохождения.

Для простоты рассмотрим случай, когда внутри пленки учитывается лишь идеальное периодическое поле. Поскольку интенсивности дифракционных максимумов зависят также от условий сшивания периодического потенциала с потенциалом вакуума, то мы рассмотрим два предельных случая, соответствующих сшиванию на экстремумах периодического потенциала. Очевидно, что остальные случаи являются промежуточными.

На экстремумах периодического потенциала производная от соответствующей ФГ обращается в нуль, вследствие чего $J^- = J^+ = J$. Тогда коэффициенты отражения и прохождения принимают следующий вид:

$$R = \frac{4\, r \sin^2 q_z d}{(1-r)^2 \cos^2 q_z d + (1+r)^2 \sin^2 q_z d}, \tag{7}$$

$$T = \frac{(1-r)^2}{(1-r)^2 \cos^2 q_z d + (1+r)^2 \sin^2 q_z d}, \tag{8}$$

где r — зависящий от проекции волнового вектора вдоль плоскости коэффициент отражения при падении электрона на полубесконечный кристалл [3].

Для применения полученных результатов к конкретным кристаллам необходимо вычислить соответствующую квазиодномерную ФГ. Вычисление трехмерной ФГ для идеального кристалла в настоящее время, как правило, осуществляется методом псевдопотенциалов с применением ЭВМ. Исключение составляют некоторые частные модели, в которых удается задачу решить аналитически. В качестве примера мы рассмотрим модель полупроводникового кристалла с узкой запрещенной зоной, когда квазиодномерную ФГ можно вычислить явно в двухзонном приближении $k \cdot p$-метода. При $\mathbf{k}_\perp = 0$, $n = 0$ и $E > 0$ имеем

$$G_z(z_0, z_0; E) = i\frac{a}{2\pi}\left(\frac{E}{\Delta} + \cos\frac{2\pi}{a} z_0\right), \tag{9}$$

---

* Обратим особое внимание на это обстоятельство. В многочисленных применениях метода ФГ в разрешенном участке спектра ФГ, как правило, имеет как мнимую, так и действительную части.

где a — постоянная решетки в направлении z, Δ — полуширина запрещенной зоны. Квазиволновое число есть $q_z = \sqrt{2m \frac{E^2 - \Delta^2}{2\Delta}}$, где m — эффективная масса.

В рассматриваемой модели коэффициент R имеет вид

$$R = \left| \frac{\sqrt{E \mp \Delta} - \varphi \sqrt{E \pm \Delta}}{\sqrt{E \mp \Delta} + \varphi \sqrt{E \pm \Delta}} \right|, \quad \varphi = \frac{a}{2\pi} \frac{i}{G_1}, \tag{10}$$

где верхний знак соответствует случаю сшивания на максимуме периодического потенциала, а нижний — на минимуме. Величина φ в случае падения медленных электронов обычно порядка единицы, но зависит от энергии и формы падения потенциала поверхности. Например, в модели скачкообразного изменения потенциала поверхности $\varphi = \frac{a}{2\pi} \sqrt{E - V_0}$, где V_0 — потенциал вакуума. Поскольку в принятой модели полупроводника $\Delta \ll E \sim |V_0|$, в формуле (10) можно ограничиться первым членом разложения по малому параметру $\frac{\Delta}{E}$:

$$R_{\pm} = \left| \frac{1 - \varphi}{1 + \varphi} \right|^2 \left(1 \mp \frac{4\varphi}{1 - \varphi^2} \frac{\Delta}{E} \right). \tag{11}$$

В заключение отметим, что формулы (7) и (8) остаются справедливыми и при учете отклонения потенциала решетки от периодичности вблизи границ. Тогда величина d есть толщина той области, где потенциал является идеально периодическим, а область искажения можно учесть в коэффициенте r, вычисляя его с помощью ФГ двухконтактной задачи [11].

Ереванский государственный
университет

Поступила 30.IV.1978

ЛИТЕРАТУРА

1. *F. Garcia-Moliner*. Ann. Phys., 2, 179 (1977).
2. *I. Bartoš, B. Velický*. Czech. J. Phys., B24, 981 (1974); Surf. Sci., 47, 495 (1975).
3. *З. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян*. Тезисы докл. VI Всесоюзного совещания по физике поверхностных явлений в полупроводниках, Киев, 1977; Ученые записки ЕГУ, № 1, 52 (1979).
4. *З. А. Касаманян*. Изв. АН АрмССР, Физика, 11, 436 (1976).
5. *B. Velický, I. Bartoš*. J. Phys., C4, L104 (1971).
6. *F. Flores, E. Louis, J. Rubio*. J. Phys., C5, 3469 (1972).
7. *А. А. Варданян, З. А. Касаманян*. Изв. АН АрмССР, Физика, 12, 129 (1977).
8. *I. Bartoš*. Phys. St. Sol. (b), 85, K127 (1978).
9. *З. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян*. Мол. научн. работник ЕГУ, 24, 59 (1976).
10. *З. А. Касаманян*. ЖЭТФ, 69, 281 (1975).
11. *З. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян*. Ученые записки ЕГУ, № 3, 43 (1977).

ԲԱՐԱԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻՑ ԴԱՆԴԱՂ ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁՄԱՆ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Է. Ս. ՅՈՒԶԲԱՇՅԱՆ, Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

Ուսումնասիրված է դանդաղ էլեկտրոնների անդրադարձումը կամ դիֆրակցիան այն դեպքում, երբ խոտորումների տեսությունը իրավացի չէ։ Ենթադրելով, որ թաղանթի հարթ սահմանների երկայնքով համակարգը օժտված է ինվարիանտությամբ պարբերական տեղափոխման նկատմամբ, սակայն բյուրեղային պոտենցիալի փոփոխականների անջատում հնարավոր չէ, բավականին լավ մոտավորությամբ խնդիրը բերված է քվազիմիաչափ դեպքին։ Ցույց է տրված, որ դիֆրակցիոն մաքսիմումների ինտենսիվությունը կախված է նաև սահմանի վրա կարման պայմաններից, որը ցուցադրվում է նեղ արգելված գոտիով կիսահաղորդչային բյուրեղի մոդելի վրա։

ON THE THEORY OF SLOW ELECTRON REFLECTION FROM THIN CRYSTAL STRUCTURE

E. S. YUZBASHYAN, Z. H. KASAMANYAN

The problem of the reflection or diffraction of slow electrons is considered in the case of inapplicability of perturbation theory approximation. Assuming the translational invariance of the system along the plane boundaries of the film, the problem is reduced to the quasi-onedimensional. It is shown, that the intensities o diffraction maxima depend also on the matching conditions.