

Расчет дифракции отраженных электронов на монокристалле

© И.Ж. Безбах¹, Б.И. Мясников², И.Н. Радченко²

¹Филиал Института кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
НИЦ «Космическое материаловедение», Калуга, 248033, Россия

²МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, Калуга, 248000, Россия

В статье приведены результаты применения математического моделирования для одного из основных методов исследования физико-химических свойств поверхности твердого тела — дифракции электронов. Кратко изложены основы теории процесса дифракции микрочастиц, описан алгоритм расчета (в программе MathCAD) и приведено графическое представление полученных результатов. Рассматриваемая работа позволяет прогнозировать процессы дифракции отраженных электронов на поверхности монокристалла при задаваемых параметрах исследуемого процесса. Полученные результаты моделирования дифракционных процессов могут быть использованы в качестве наглядного иллюстративного материала при изучении электронографии.

Ключевые слова: кристаллография, дифракция, монокристалл, спектр рассеяния, угол скольжения.

В конце прошлого века произошел резкий скачок методического уровня проведения исследований локального состава, структуры и физико-химических свойств поверхности твердого тела [1, 2]. С появлением и развитием техники сверхвысокого вакуума появилась возможность для реального развития таких методов исследования поверхности, как дифракция медленных электронов и полевая эмиссия [2–4]. Стало ясно, что именно успехи в изучении автоэлектронной эмиссии, дифракции электронов, в совершенствовании техники сверхвысокого вакуума и детектирования малых сигналов (наряду с открытием эффекта Оже), а также рентген электронной эмиссии привели к созданию принципиально новых методов исследования поверхности твердых тел [5, 6]. Их разнообразие и быстрое развитие требуют привлечения новых методик обработки и интерпретации получаемых экспериментальных данных.

Применение современных алгоритмов программирования с использованием пакетов программ математического моделирования (MathCAD, MATLAB и др.) позволяет эффективно обрабатывать и представлять результаты исследований, наглядно демонстрировать динамику процессов на поверхности твердого тела.

Одним из основополагающих явлений, описываемых квантовой механикой, является универсальный корпускулярно-волновой дуализм материи. Однако несоответствие представлений дуализма материи традиционным классическим значительно осложняет понимание и усвоение материала этого раздела курса квантовой механики. Использование моделирования физических процессов, объясняемых, в частности, наличием волновых свойств микрочастиц, даст возможность повысить наглядность изучаемых явлений, а также значительно упростить расчеты исследуемых параметров и характеристик.

Согласно гипотезе де Бройля, материальные частицы обладают волновыми свойствами, причем соотношения, связывающие волновые и корпускулярные характеристики частиц, остаются такими же, как и в случае электромагнитного излучения [7]. Так, движение свободной частицы с энергией E_k и импульсом \mathbf{p} описывают как волновой процесс с длиной волны де Бройля

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0E_k}},$$

где h — постоянная Планка; m_0 — масса покоя.

В рассматриваемом случае кинетическая энергия электрона $E_k \ll m_0c^2$ определяется ускоряющим напряжением $E_k = eU_{\text{уск}}$.

Первыми экспериментальными исследованиями, подтвердившими волновую природу частиц, признаны классические опыты Дэвисона и Джермера по дифракции отраженных электронов на монокристаллах [4, 8]. При этом электроны с длиной волны λ_B дифрагируют на различных атомных плоскостях, выбор которых определяется взаимной ориентацией падающего пучка электронов и рассеивающими кристаллическими плоскостями. Электроны направлялись на кристалл под углом скольжения θ по отношению к рассеивающему семейству плоскостей с межплоскостным расстоянием d .

Интенсивный дифракционный максимум n -го порядка отраженной волны возникает при значении угла θ , удовлетворяющем условию Брэгга — Вульфа ($2d \sin \theta = n\lambda_B$). Физический смысл условия Брэгга — Вульфа достаточно прозрачен: дифракционный максимум появляется в тех случаях, когда разность хода волн, отраженных от соседних атомных плоскостей, равна целому числу длин волн де Бройля. Именно в этом случае отраженные волны взаимоусиливаются, т. е. происходит конструктивная интерференция [9].

С учетом преломления электронных пучков на атомарных плоскостях условие Брэгга — Вульфа принимает вид

$$2d\sqrt{n_e^2 - \cos^2 \theta} = n\lambda_B,$$

$$n_e = \sqrt{1 + \frac{A_B}{E_k}} = \sqrt{1 + \frac{A_B}{eU_{\text{уск}}}}$$

Здесь n_e — показатель преломления электронных волн в кристалле; A_B — работа выхода электрона. Как правило, работа выхода составляет единицы электронвольт, поэтому преломление наблюдается при сравнительно небольших ускоряющих напряжениях.

Из приведенного выше условия дифракционных максимумов не сложно выявить зависимость угла отражения электронного пучка от ускоряющего напряжения [10]. В целях отображения результатов проведенного анализа была разработана расчетная программа с помощью MathCAD. Для обеспечения наглядности процесса на основе этой расчетной программы была создана электронная книга. Материал в файле структурирован: даны значения физических констант, используемых в работе; кратко описана теория процесса дифракции и приведены основные формулы для этого явления. Графически результаты расчета угла скольжения θ электронного пучка для нескольких дифракционных максимумов представлены на рис. 1.

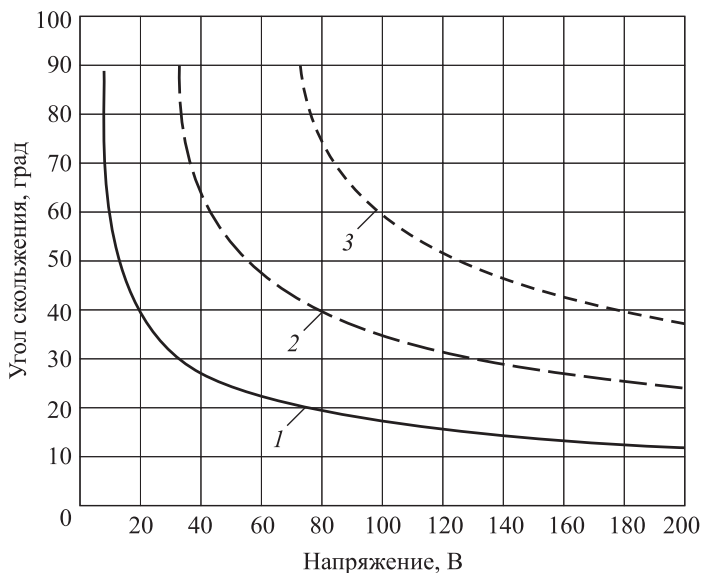


Рис. 1. Зависимости $\theta(U_{\text{уск}})$ с дифракционными максимумами $n = 1$ (1), 2 (2), 3 (3)

С помощью полученных зависимостей $\theta(U_{\text{уск}})$ можно оценить напряжение, необходимое для возникновения того или иного дифракционного максимума и соответствующий угол наблюдения [10]. В зависимости от постоянной решетки рассеивающего монокристал-

ла изменяются условия дифракции, и характер этого изменения можно увидеть, варьируя значение d . В разработанной программе предусмотрен пункт расчета конкретных значений длины волны де Бройля электронов, углов скольжения и отражения электронного пучка для задаваемого ускоряющего напряжения. Наибольший практический интерес для исследований имеет определение значений порогового ускоряющего напряжения, т. е. решение уравнения $\theta(U_{\text{уск}}) = 90^\circ$.

Расширенные возможности программы MathCAD позволяют наглядно представить динамику процесса путем создания анимации в формате avi. Фрагмент видеоролика длительностью 20 с представлен на рис. 2. Видеоролик дает наглядное представление об изменении хода лучей (падающего и отраженного потоков электронов) в зависимости от ускоряющего напряжения. В правом поле экрана установлен счетчик напряжения и текущие углы отражения $\beta_1 - \beta_3$ для соответствующего дифракционного максимума.

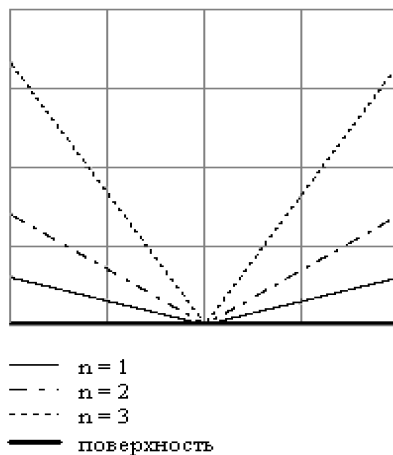


Рис. 2. Траектории падающего и отраженного потоков электронов в зависимости от ускоряющего напряжения $U_{\text{уск}} = 100 \text{ В}$ при $\beta_1 = 147^\circ$, $\beta_2 = 110^\circ$, $\beta_3 = 62^\circ$ (фрагмент видеоролика)

Представленная работа позволяет прогнозировать процессы отражательной дифракции на поверхности того или иного монокристалла при заданных параметрах исследуемого процесса. Кроме того, моделируемые дифракционные процессы могут использоваться как наглядный иллюстративный материал при изучении электронографии — метода исследования кристаллических структур с помощью явления отражательной дифракции электронов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. *Введение в физику поверхности*. Москва, Наука, 2006, 490 с.
- [2] Троян В.И., Пушкин М.А., Борман В.Д., Тронин В.Н. *Физические основы методов исследования наноструктур и поверхности твердого тела*. Москва, МИФИ, 2008, 260 с.
- [3] Бёккер Ю. *Спектроскопия*. Москва, Техносфера, 2009, 527 с.
- [4] Рамбиди Н.Г., ред. *Спектроскопия и дифракция электронов при исследовании поверхности твердых тел*. Москва, Наука, 1990, 356 с.
- [5] Синдо Д., Оикава Т. *Аналитическая просвечивающая электронная микроскопия*. Москва, Техносфера, 2006, 255 с.
- [6] Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. *Рентгенографический и электронно-оптический анализ*. Москва, Металлургия, 2003, 360 с.
- [7] Подсвиров О.А. Новые аспекты динамической дифракции электронов в кристалле. *Известия РАН. Сер. Физическая*. 2007, т. 71, №10, с. 1471–1480.
- [8] Эгертон Р.Ф. *Физические принципы электронной микроскопии*. Москва, Техносфера, 2010, 304 с.
- [9] Lipson S.G., Lipson H., Tannhauser D.S. *Optical Physics*, Cambridge, UK, 2009, p. 368.
- [10] Пул Ч. *Справочное руководство по физике*. Москва, Мир, 2008, 462 с.

Статья поступила в редакцию 28.11.2014

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Безбах И.Ж., Мясников Б.И., Радченко И.Н. Расчет дифракции отраженных электронов на монокристалле. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2015, вып. 2. URL: <http://engjournal.ru/catalog/msm/hidden/1369.html>

Безбах Илья Жанович родился в 1978 г., окончил Калужский филиал МГТУ им. Н.Э. Баумана в 2001 г. Канд. физ.-мат наук, доцент кафедры физики Калужского филиала МГТУ им. Н.Э. Баумана, научный сотрудник Филиала Института кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН НИЦ «Космическое материаловедение». Автор более 20 статей по методам и аппаратуре для выращивания кристаллов (полупроводники, кристаллы биологических материалов). e-mail: biz001@mail.ru

Мясников Борис Иванович родился в 1938 г., окончил Ленинградский электротехнический институт им. В.И. Ульянова-Ленина. Канд. техн. наук, доцент кафедры физики Калужского филиала МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 46 печатных работ. Область научных интересов: электромагнитная дефектоскопия. e-mail: myasnikov-bi@mail.ru

Радченко Ирина Николаевна родилась в 1961 г., окончила Ленинградский политехнический институт им. М.И. Калинина. Канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры физики Калужского филиала МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 40 печатных работ в области физической электроники и физики твердого тела. e-mail: rin-kf@yandex.ru

Calculation of reflection electron diffraction on a single crystal

© I.Zh. Bezbakh¹, B.I. Myasnikov², I.N. Radchenko²

¹”Space Materials” Science and Research Center of the Shubnikov Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences, Kaluga, 248640, Russia

²Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch, Kaluga, 248000, Russia

The paper presents the results of mathematical modeling for one of the main methods of investigating physical and chemical properties of the surface of solids – electron diffraction. A summary of the basic theory of the micro particles diffraction process with formulae are given. The algorithm for calculating (in MathCAD) is described and a graphical representation of the results is presented. This work allows predicting the course of reflected electrons diffraction on the surface of a single crystal with specified parameters of the test process. The obtained results of modeling diffraction process can be used as an illustrative exemplification material when studying electronography.

Keywords: crystallography, diffraction, single crystal, scattering spectrum, glancing angle.

REFERENCES

- [1] Oura K., Lifshits V.G., Saranin A.A., Zotov A.V., Katayama M. *Vvedenie v fiziku poverkhnosti* [Introduction to Surface Physics]. Moscow, Nauka Publ., 2006, 490 p. [in Russian].
- [2] Troyan V.I., Pushkin M.A., Borman V.D., Tronin V.N. *Fizicheskie osnovy metodov issledovaniya nanostruktur i poverkhnosti tverdogo tela* [Physical basis of research techniques of nanostructures and solid surface]. Moscow, MEFPh Publ., 2008, 260 p.
- [3] Bercker U. *Spektroskopiya* [Spectroscopy]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2009, 528 p. [in Russian].
- [4] Rambidi N.G., ed. *Spektoskoiya i difraktsiya elektronov pri issledovanii poverkhnosti tverdykh tel* [Spectroscopy and electron diffraction in the study of the surface of solids]. Moscow, Nauka Publ., 1990, 356 p.
- [5] Sindo D., Oikawa T. *Analiticheskaya prosvechivayuschaya elektronnaya mikroskopiya* [Analytical transmission electron microscopy]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2006, 256 p.
- [6] Gorelik S.S., Rastorguev L.N., Skakov Yu.A. *Rentgenograficheskiy i elektronno-opticheskiy analiz* [X-ray and electron-optical analysis]. Moscow, Metallurgiya Publ., 2003, 360 p.
- [7] Podsvirov O.A. *Izvestiya RAN. Seriya Fizicheskaya — Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2007, vol. 71, no.10, pp. 1471–1480.
- [8] Agerton R.F. *Fizicheskie printsipy elektronnoy mikroskopii* [Physical principles of electron microscopy]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2010, 304 p.
- [9] Lipson S.G., Lipson H., Tannhauser D.S. *Optical Physics*, Cambridge University Press, 1995, 514 p.

[10] Pul Ch. *Spravochnoe rukovodstvo po fizike* [Reference Guide to Physics]. Moscow, Mir Publ., 2001, 461 p.

Bezbakh I.Zh. (b. 1978) graduated from Kaluga Branch of Bauman Moscow State Technical University in 2001. Ph.D., Assoc. Professor of the Physics Department at KB of Bauman MSTU. The author of more than 20 works on methods and the equipment for crystal growth (semiconductors, crystals of biological materials). e-mail: biz001@mail.ru

Myasnikov B.I. (b. 1938) graduated from Leningrad Electrotechnical Institute (LETI) named after V.I. Ulyanov in 1962. Ph.D., Assoc. Professor of the Physics Department at Kaluga Branch of Bauman Moscow State Technical University. Scientific interests include automation of technological processes. e-mail: myasnikov-bi@mail.ru

Radchenko I.N. (b. 1961) graduated from the Leningrad Polytechnic Institute named after M.I. Kalinin. Ph.D., Assoc. Professor of the Physics Department, Kaluga Branch of Bauman Moscow State Technical University. The author of more than 40 scientific works in physical electronics and solid state physics. e-mail: rin-kf@yandex.ru