

Слабая локализация неупруго отраженных электронов в условиях Оже-эмиссии

© В.В. Дубов, В.В. Кораблев

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
194251 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: quark@stu.neva.ru

(Поступила в Редакцию 24 ноября 2000 г.)

Рассмотрен новый тип слабой локализации электронов, возникающий при эмиссии электронов. Он проявляется в особенностях угловых спектров неупруго отраженных от твердого тела частиц, вызвавших ионизацию Оже-атомов. Возникающие ориентационные зависимости являются результатом интерференции двух типов процессов. В одном случае внешний электрон первичного пучка, проникая в твердое тело, испытывает неупругое рассеяние, ионизует атом, а затем происходит его упругое рассеяние на большой угол и электрон покидает твердое тело. Во втором случае упругое рассеяние электрона предшествует неупругому рассеянию частицы при ионизации Оже-атома. Азимутальные угловые зависимости токов неупруго отраженных электронов содержат информацию о процессах нового типа слабой локализации частиц.

В представленной работе исследуются эффекты когерентности, возникающие при эмиссии Оже-электронов из твердого тела. Такая эмиссия имеет место при облучении кристаллических (как упорядоченных — монокристаллов, так и неупорядоченных) образцов внешними электронами промежуточных энергий (лежащих в диапазоне от нескольких сотен eV до нескольких keV).

Слабая локализация нового типа возникает при интерференции электронных волн, испытывающих как упругое, так и неупругое рассеяния. Такая локализация в отличие от традиционной слабой локализации андерсоновского типа реализуется в том случае, когда наряду с упругим рассеянием испытывающие локализацию электроны рассеиваются также и неупруго. В обычной андерсоновской локализации роль неупругих процессов вторична и негативна, поскольку неупругое рассеяние обычно нарушает когерентные процессы. Слабая же локализация электронов нового типа возникает при наличии процессов неупругого рассеяния частиц.

Новый тип слабой локализации приводит к появлению определенного вида угловых зависимостей на регистрируемых интенсивностях частиц, которые наряду с упругим рассеянием испытывают и неупругое рассеяние в неупорядоченной среде. Эти угловые зависимости не связаны с угловыми зависимостями элементарных процессов рассеяния (например, с угловой зависимостью атомного сечения рассеяния). Возможность такой локализации была установлена ранее [1] в модели, в которой упругие столкновения сводились к многократным рассеяниям на малые углы и борновским упругим однократным рассеяниям на большой угол.

В дальнейшем было показано [2], что упругие многократные столкновения электронов с рассеянием на произвольные углы не нарушают слабую локализацию нового типа, хотя такие столкновения являются некогерентными и в общем случае приводят к полному либо частичному сглаживанию ориентационных когерентных эффектов. Исследовано также влияние поверхности на

угловые зависимости вероятности рассеяния электронов, отражающихся от неупорядоченной полуограниченной среды в условиях квантового транспорта, когда соотношение между углом падения электронов на поверхность и углом их вылета с поверхности является произвольным.

Полученные теоретические результаты позволили рассматривать возможность фиксирования процессов нового типа слабой локализации в экспериментальных исследованиях взаимодействия электронов с неупорядоченными твердыми телами.

К экспериментам такого рода относятся наблюдения угловых спектров электронов при Оже-эмиссии [3,4]. Техника эксперимента, связанная с регистрацией именно азимутальных зависимостей [4,5] на угловых спектрах, оказывается наиболее удобной в случае исследования слабой локализации нового типа [1,2].

Слабую локализацию нового типа могут испытывать электроны различных групп, рассеивающихся как упруго, так и неупруго в твердом теле. Это могут быть эмитируемые твердым телом Оже-электроны либо электроны первичного пучка, испытавшие как упругое рассеяние на атомах твердого тела (в том числе на большой угол), так и неупругое рассеяние, например на начальной стадии генерации Оже-электрона. В настоящей работе мы уделим основное внимание электронам, участвующим в процессах второго типа, сопровождающих Оже-эмиссию.

Волновая функция электрона, рассеивающегося неупруго в неупорядоченных твердых телах

Рассматриваемая система состоит из полубесконечно неупорядоченного твердого тела, занимающего полупространство $z > 0$ (ось z перпендикулярна поверхности твердого тела), и взаимодействующего с ним внешнего электрона промежуточной энергии.

Обычно в ходе экспериментальных исследований Оже-эмиссии изучаются изменения интенсивности эмитируемых Оже-электронов в зависимости от различных параметров, например от энергии и угла падения на образец первичных электронов, от углов вылета (эмиссии) Оже-электронов и от иных величин.

Нас будут интересовать электроны первичного пучка, проникающие в кристалл, рассеивающиеся там упруго, в том числе на большие углы, и неупруго при первичной ионизации Оже-атома и затем покидающие твердое тело.

Преыдушие исследования [1,2] нового типа слабой локализации электронов показали, что существенными при регистрации эффектов такой локализации оказываются угловые азимутальные зависимости интенсивностей рассеявшихся электронов. Именно эти азимутальные зависимости, но применительно к выходящим из твердого тела Оже-электронам обычно регистрируются в экспериментах по Оже-эмиссии при исследованиях анизотропии выхода [4,5]. В настоящей работе показано, что новый тип слабой локализации электронов при их рассеянии в неупорядоченных средах может проявляться на азимутальных зависимостях интенсивностей неупруго отраженных электронов. Волновую функцию системы, состоящей из твердого тела и рассеиваемого им внешнего электрона первичного пучка, обозначим как $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. Здесь \mathbf{r} — координата внешнего электрона, \mathbf{R} — набор координат частиц среды. Волновая функция $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ удовлетворяет уравнению

$$\Delta\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - U(\mathbf{R})]\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0. \quad (1)$$

Здесь оператор Лапласа Δ содержит вторые производные по всем компонентам радиус-векторов \mathbf{r} налетающей частицы и частиц среды \mathbf{R} . $U(\mathbf{r})$ есть суммарный потенциал случайным образом расположенных центров рассеяния, на которых внешняя частица рассеивается упруго. Потенциал $U(\mathbf{R})$ описывает взаимодействие частиц среды. $U(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ есть потенциальная энергия взаимодействия внешней частицы с частицами среды.

Волновая функция рассматриваемой системы $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ может быть разложена в ряд по полному ортонормированному набору волновых функций $\Phi_n(\mathbf{R})$ частиц среды

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{R}). \quad (2)$$

Волновые функции $\Phi_n(\mathbf{R})$, описывающие состояние частиц рассеивающей среды, удовлетворяет уравнению

$$\Delta_{\mathbf{R}} \Phi_n(\mathbf{R}) + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon_n - U(\mathbf{R})] \Phi_n(\mathbf{R}) = 0, \quad (3)$$

где ε_n — энергия среды.

Решение записанных уравнений в нулевом по взаимодействию внешней частицы с частицами неупорядоченного твердого тела приближении имеет следующий вид:

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_0(\mathbf{r}) \Phi_0(\mathbf{R}). \quad (4)$$

Функция $\Phi_0(\mathbf{R})$ — это волновая функция частиц твердого тела, находящихся в основном невозбужденном состоянии.

Функция $\psi_0(\mathbf{r})$ есть невозмущенная волновая функция внешнего электрона. Эта функция, записанная в пренебрежении взаимодействием внешнего электрона с частицами среды, имеет вид плоской волны с волновым вектором \mathbf{k}_0 , причем $|\mathbf{k}_0| = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Однако такую волновую функцию, описывающую движение электрона внешнего первичного пучка в среде с хаотически расположенными рассеивающими центрами, удобно записывать с учетом усредненных электрон-электронных взаимодействия. Прежде всего будем учитывать в той части волновой функции, которая описывает движение внешнего электрона внутри твердого тела (т.е. для $z > 0$), уменьшение энергии (и волнового вектора) частицы за счет взаимодействия со средним внутрикристаллическим потенциалом U_0 неупорядоченной среды (поверхностным потенциальным барьером). Таким образом, волновая функция $\psi_0(\mathbf{r})$ в среде должна иметь вид плоской волны с волновым вектором \mathbf{k} , где $|\mathbf{k}| = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}$.

Помимо этого, в волновой функции $\psi_0(\mathbf{r})$ учтем затухание, вызванное процессами неупругого взаимодействия внешнего электрона с твердым телом при движении частицы в полупространстве $z > 0$. Неупругим взаимодействием с протяженным потенциалом в области $z < 0$ вблизи поверхности кристалла, т.е. вне твердого тела, можно пренебрегать [6].

Учет влияния неупругих процессов на движение внешнего электрона в твердом теле, осуществленный в рамках модели оптического потенциала U_{opt} [7], приводит к появлению в волновой функции внешней частицы $\psi_0(\mathbf{r})$ в области $z > 0$ мультипликативного экспоненциально затухающего сомножителя вида $\exp(-\kappa z / \cos \theta)$, где κ — коэффициент затухания, определяемый обычным образом через мнимую часть U_i оптического потенциала U_{opt} , а θ — угол падения частицы первичного пучка на поверхность твердого тела.

Записав таким образом решение уравнений в нулевом приближении, рассмотрим первый порядок теории возмущений для процесса рассеяния внешнего электрона частицами среды в случае генерации Оже-эмиссии.

Поправку $\psi^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ первого порядка к невозмущенной волновой функции $\psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ запишем в виде разложения, аналогичном (2),

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_n \psi_n^{(1)}(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{R}), \quad (5)$$

где ортогональные функции $\Phi_n(\mathbf{R})$ описывают возбужденные состояния среды.

Уравнение первого порядка теории возмущений для внутрикристаллической области $z > 0$ будет иметь вид

$$\begin{aligned} & \Delta \sum_n \psi_n^{(1)}(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{R}) \\ & + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\mathbf{R}) - U_{\text{opt}}] \sum_n \psi_n^{(1)}(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{R}) \\ & = \frac{2m}{\hbar^2} [U(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \psi_0(\mathbf{r}) \Phi_0(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (6)$$

Умножая это уравнение на $\Phi_n^*(\mathbf{R})$ и интегрируя по всем компонентам координат частиц среды, получаем уравнение для определения поправки $\psi_n^{(1)}(\mathbf{r})$ первого порядка теории возмущений к искомой волновой функции первичной частицы

$$\Delta\psi_n^{(1)}(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - \varepsilon_n - U_{\text{opt}}]\psi_n^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}[U(\mathbf{r})\delta_{on} + \int d\mathbf{R}\Phi_n^*(\mathbf{R})U(\mathbf{r}, \mathbf{R})\Phi_i(\mathbf{r})]. \quad (7)$$

Решение этого уравнения может быть записано через его функцию Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Используя введенное ранее [2] обозначение, характеризующее амплитуду неупругого взаимодействия внешнего электрона с частицами неупорядоченного поликристалла

$$T(\mathbf{r}, i \rightarrow n) = \int d\mathbf{R}\Phi_n^*(\mathbf{R})U(\mathbf{r}, \mathbf{R})\Phi_0(\mathbf{R}), \quad (8)$$

запишем решение уравнения (7)

$$\psi_n^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}'G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [U(\mathbf{r})\delta_{on} + T(\mathbf{r}', i \rightarrow n)]\psi_0(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Здесь $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ есть функция Грина уравнения (7), которая в полупространстве $z > 0$, занимаемом средой, удовлетворяет соответствующему уравнению

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{2m}{\hbar^2}[E - \varepsilon_n - U_{\text{opt}}]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (10)$$

Следующее приближение $\psi_n^{(2)}(\mathbf{r})$ для поправки к волновой функции внешнего электрона, испытавшего неупругое рассеяние, записывается аналогично поправке первого порядка (9) и для внутрикристаллической области имеет вид

$$\psi_n^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}'G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [U(\mathbf{r})\psi_f^{(1)}(\mathbf{r}) + \sum_n T(\mathbf{r}', n \rightarrow f)\psi_n^{(1)}(\mathbf{r})]. \quad (11)$$

В дальнейшем конкретные, в том числе компьютерные, расчеты будут проводиться для вычисления волновых функций электрона, рассеивающегося в твердом теле упруго и неупруго, в первом либо втором приближении с использованием формул (9) и (11). В свою очередь волновые функции электрона позволяют записать интенсивности рассеянных твердым телом электронов. Эти интенсивности и могут наблюдаться при экспериментальных исследованиях.

Использование в вычислениях более высоких, чем второе, приближений не вносит в физическую картину принципиально новых, по крайней мере ориентационных, эффектов. В то же время использование вышеуказанных приближений позволило выявить имеющие место эффекты слабой локализации нового типа для неупруго рассеивающихся электронов.

Интенсивность неупруго рассеянных электронов определяется матрицей плотности

$$\rho_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}') \rangle. \quad (12)$$

Угловые скобки в правой части равенства (12) соответствуют усреднению по расположению центров рассеяния.

Проводимые вычисления упрощаются в том случае, когда фактор TT^* может быть вынесен из-под знака усреднения. Это будет иметь место и в рассматриваемом нами приближении. Влияние неупругого канала на самого себя следует при необходимости учитывать в более высоких, чем записанные выше, приближениях теории возмущений. Принципиально важные основания для такого учета в решаемой задаче отсутствуют.

Ток неупруго отраженных электронов будет также содержать произведения $U(\mathbf{r})U^*(\mathbf{r})$. Поскольку мы выделили среди потенциалов оптическую составляющую U_{opt} , потенциал $U(\mathbf{r})$ представляет собой суперпозицию расположенных хаотическим образом атомных остовов, на которых электрон рассеивается упруго на большие углы.

Ток неупруго отраженных от твердого тела электронов определяется асимптотиками формул (9) и (11). Ранее было показано [1,2], что эффекты слабой локализации нового типа будут проявляться в интенсивностях электронов, которые испытывают одновременно и неупругое рассеяние, и упругое некогерентное рассеяние. Группа таких электронов может быть выделена экспериментально. В полученных формулах нас будут также интересовать интенсивности электронов этой группы.

Угловые спектры отраженных частиц определяются интегралом по перпендикулярным оси z координатам

$$\int d\rho d\rho' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-ik_{\parallel}(\rho - \rho')}. \quad (13)$$

Асимптотика функции Грина, определяющая асимптотику волновых функций (9) и (11), имеет вид

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik'r}}{4\pi r} \langle \psi_0^*(\mathbf{r}') \rangle \quad (14)$$

и зависит от волнового вектора \mathbf{k}' вылетающего электрона.

Волновая функция (11), определяющая искомый ток неупруго отраженных от неупорядоченного твердого тела электронов, содержит сумму, которую в операторном виде можно представить следующим образом:

$$\hat{G} \left\{ \hat{U} \cdot \hat{G}[\hat{U} + \hat{T}] + \sum_n \hat{T} \hat{G}[\hat{U} + \hat{T}] \right\}. \quad (15)$$

Интересующая нас группа электронов, ток которых включает эффекты нового типа слабой локализации, описывается слагаемыми вида

$$\hat{G} \left\{ \hat{U} \hat{G} \hat{T} + \sum_n \hat{T} \hat{G} \hat{U} \right\}, \quad (16)$$

которые в дальнейшем и будем рассматривать.

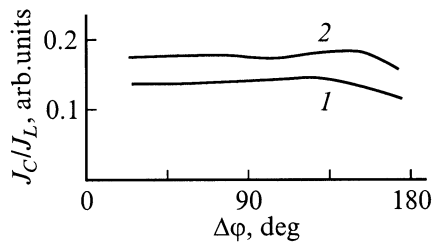


Рис. 1. Угловая зависимость степени когерентности J_C/J_L от разности азимутальных углов $\Delta\varphi$. $\theta = \theta' = 45^\circ$, $E/\Delta E = 10$, $E/U_i = 120$ (1) и 60 (2).

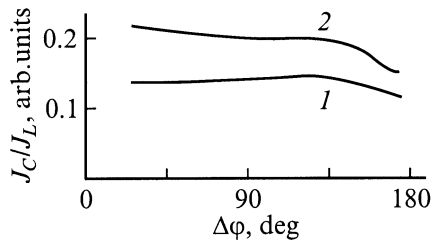


Рис. 2. Угловая зависимость степени когерентности J_C/J_L от разности азимутальных углов $\Delta\varphi$. $E/\Delta E = 10$, $E/U_i = 120$, $\theta = \theta' = 45$ (1) и 60° (2).

Интенсивности неупруго отраженных от твердого тела электронов будут определяться квадратом модуля суммы (16). Полученные формулы (8), (9), (11), (13) и асимптотика (14) позволяют рассчитать искомые интенсивности.

Следуя выдвинутым ранее предположениям, в суммарном токе отраженных электронов J выделим две части: J_L и J_C . Первый ток J_L будет определяться суммой квадратов модулей первого и второго слагаемых в (16). Ток J_C содержит перекрестные слагаемые квадрата модуля (16). Отношение тока J_C и J_L обычно называют степенью когерентности.

Угловые зависимости двух частей, J_L и J_C , суммарного тока J могут быть различными. Как показали компьютерные расчеты, такая ситуация имеет место в рассматриваемом случае. Следовательно, степень когерентности будет зависеть от азимутального угла выхода электронов. Эта зависимость своим происхождением обязана в том числе наличию нового типа слабой локализации электронов при движении последних в неупорядоченном твердом теле.

Проведенные теоретический анализ и компьютерные расчеты позволяют исследовать ориентационные эффекты, возникающие при неупругом отражении электронов от неупорядоченных твердых тел в условиях Оже-эмиссии. Анализ показывает, что величина J_C/J_L содержит угловую зависимость. Рассматривается ситуация, когда полярные углы падения на твердое тело электрона первичного пучка и выхода неупруго рассеянного электрона в вакуум фиксированы.

Исследована зависимость степени когерентности J_C/J_L от разности азимутальных углов падения и выхода частиц. Такая азимутальная зависимость оказывается немонотонной. Обычно имеют место максимум на этих кривых при разностях углов $\Delta\phi$, близких к величине $2\pi/3$, и последующий провал при приближении $\Delta\phi$ к значению π .

Угловые кривые оказываются очень чувствительными к параметрам рассматриваемой задачи. К таким параметрам относятся в первую очередь внутрикристаллические характеристики, а также параметры волновой функции проникающего в твердое тело электрона и величина энергии ΔE , передаваемой среде внешней частицей.

На рис. 1, 2 приведены рассчитанные зависимости от разности азимутальных углов $\Delta\phi$ величины степени когерентности J_C/J_L при различных значениях параметров. В частности, представляет интерес чувствительность угловых спектров к значениям параметров оптического потенциала U_0 и U_i , а также к величине потери энергии ΔE . Зависимости $J_C/J_L(\Delta\phi)$ приведены для различных вышеуказанных величин и для двух фиксированных, равных $\pi/4$ и $\pi/3$, значений полярных углов θ и θ' волновых векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' .

При заданных значениях параметра $E/\Delta E$, как видно из рис. 1, эффект на угловых зависимостях J_C/J_L проявляется более отчетливо с ростом отношения E/U_i . Рассматриваемый эффект оказывается также более ярко выраженным при увеличении полярных углов θ и θ' (рис. 2).

Проведенный анализ позволяет сделать вывод о возможности фиксирования эффектов нового типа слабой локализации электронов при неупругом отражении частиц в условиях Оже-эмиссии. Характеристики регистрируемых спектров можно использовать как для определения параметров твердого тела, так и для изучения элементарных актов взаимодействия частиц в твердых телах.

Список литературы

- [1] Б.Н. Либенсон, К.Ю. Платонов, В.В. Румянцев. ЖЭТФ **101**, 2, 614 (1992).
- [2] V.V. Rumyantsev, V.V. Doubov. Phys. Rev. **B49**, 13, 8643 (1994).
- [3] R. Baudoing, I. Blank, C. Gauvert. Surf. Sci. **128**, 1, 22 (1983).
- [4] М.В. Гомоюнова, И.И. Пронин. Поверхность **7**, 44 (1982).
- [5] J.D. Place, M. Prutton. Surf. Sci. **82**, 4, 315 (1979).
- [6] В.В. Дубов. ФТТ **33**, 8, 2241 (1991).
- [7] A. Howie, R.M. Stern. Z. Naturforsch. **B27a**, 382 (1972).