ЖЭТФ, 2011, том 139, вып. 2, стр. 272–280

УГЛОВАЯ КАРТИНА ЭЛЕКТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ «НА ОТРАЖЕНИЕ» В ПЛАЗМОННОМ КАНАЛЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ

*Б. Н. Либенсон**, *В. В. Кораблев*

Санкт-Петербургский технический университет
195251, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 4 мая 2010 г.

Построена теория возбуждения плазмонов быстрой заряженной частицей, испытывающей дифракцию в монокристалле, а затем упруго и некогерентно рассеивающейся на большой угол. Теория позволяет объяснить экспериментальные результаты тридцатилетней давности, которые казались странными. В этих экспериментах наблюдалось увеличение дифракционного контраста в канале неупругого электронного рассеяния, связанного с возбуждением объемного плазмона, по сравнению с дифракционным контрастом упруго и некогерентно отраженных электронов. На основе этой теории показано, что возбуждение поверхностного плазмона лишь незначительно влияет на угловую картину дифракции, оставляя ее почти такой же, как и для упруго отраженных электронов. Такие особенности упругой и неупругой дифракции можно использовать для идентификации типа энергетической плазменной потери.

1. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании анизотропии упругого и неупругого отражения электронов от монокристаллов было найдено, что электроны, испытавшие характеристические потери энергии, имеют относительную глубину модуляции дифракционных особенностей на угловых зависимостях $\Delta A/A$ (ΔA — амплитуда соответствующей дифракционной особенности, A — полная величина сигнала, являющаяся суммой ΔA и некогерентного фона), большую, чем упруго отраженные электроны [1–4]. В работе исследовались образцы Si n-типа в направлении (111). Спектр характеристических потерь энергии исследовался для различных углов падения первичных электронов с начальной энергией в диапазоне E_p = 400–600 эВ [5]. Для электронов, потерявших энергию $\hbar\omega_p$, величина $\Delta A/A_{\varphi=0}$ наибольшая. Для упруго отраженных электронов $\Delta A/A_{\varphi=0}$ почти в 1.5 раза меньше. Следует особо отметить, что «выделенными» являются энергии, соответствующие не только однократной, но и кратным объемным плазменным потерям. Например, модуляция для энергии $(E_p - 2\hbar\omega_p)$ больше, чем для соседних энергий. Таким образом, изменение

Таблица

Энергия электронов в спектре, эВ	$\dfrac{\Delta A}{A_{\varphi=0}}$
400 (E_p)	0.31
380 ($E_p - \hbar\omega_p$)	0.45
374	0.37
366 ($E_p - 2\hbar\omega_p$)	0.41
350 ($E_p - 3\hbar\omega_p$)	0.35
300	0.29
200	0.16

$\Delta A/A$ по мере изменения потерянной электроном энергии не является монотонным.

Сценарий упругого отражения с дифракцией в монокристалле для электрона промежуточной энергии представляет собой двухстадийный процесс.

На первой стадии влетающий в монокристалл электрон испытывает дифракцию Лауэ. Как и в случае прохождения, для двухволновой ориентации достаточно, чтобы падающий пучок был почти параллелен оси симметрии кристалла. В случае дифракции Лауэ необходимо направлять пучок почти перпендикулярно поверхности, так чтобы проекция век-

*E-mail: libenson-b@yandex.ru, b.n.libenson@gmail.com

тора $\mathbf{k}$ в плоскости поверхности $\mathbf{k}_\rho$ была бы параллельна вектору обратной решетки $\mathbf{g}$ и изменялась бы в пределах от $\mathbf{k}_\rho = 0$ до $\mathbf{k}_\rho = \mathbf{g}$. При этом будет выполнено условие Брэгга $\mathbf{k}_\rho = \mathbf{g}/2$ для сильного близкого отражения и вся энергия падающего пучка будет сосредоточена в двух главных пучках: проходящем пучке с $\mathbf{g} = 0$, $\mathbf{k}_{1\rho} = \mathbf{k}_\rho$ и дифракционном пучке с $\mathbf{k}_{2\rho} = \mathbf{k}_\rho - \mathbf{g}$.

Процесс дифракции обрывается при упругом некогерентном рассеянии электрона на большой угол. Этим актом завершается первая стадия процесса рассеяния. На второй стадии процесса, несмотря на одинаковое для двух пучков угловое перемешивание при упругом некогерентном рассеянии, волновые амплитуды проходящей и дифрагированной волны складываются, все время оставаясь сдвинутыми на вектор $\mathbf{g}$, так что общее разделение пучков при вылете в вакуум сохраняется, пока абсолютная величина плоской проекции вектора атомного рассеяния $|\mathbf{k}_{a\rho}|$ не превышает абсолютную величину вектора $|\mathbf{g}|$. Когда же $|\mathbf{k}_{a\rho}| > |\mathbf{g}|$, то угловое перемешивание главных пучков приводит к сложению их интенсивностей в каждом направлении вылета и это определяет некогерентный упругий фон. Доля разделения главных пучков на фоне сложения их интенсивностей является феноменологическим параметром, оценить который можно только из анализа эксперимента. Угловые распределения выходящих в вакуум пучков оказываются сдвинутыми друг относительно друга примерно на двойной угол Брэгга. Для монокристалла кремния (111) и электронов с энергией 400 эВ эти распределения сдвинуты по углу не менее, чем на 20°, что вполне достаточно для отчетливой картины дифракционного пучка. Поскольку эти пучки выходят из кристалла под разными углами, их угловое распределение можно зафиксировать раздельно друг от друга. Это качество и лежит в основе формирования дифракционной картины. Заметим также, что центрами упругого некогерентного рассеяния являются различного рода дефекты и несовершенства кристаллической структуры, находящиеся в объеме кристалла недалеко от поверхности, в том числе и собственно атомы кремния. Будем рассматривать эти несовершенства распределенными хаотически, по крайней мере, в слое толщиной 50–100 Å от поверхности. Это допущение не может быть причиной ухудшения достаточно четкой дифракционной картины и хорошего разделения главных пучков при такого рода упругих столкновениях.

Основной задачей работы является выяснение влияния плазмонной генерации (как для объемных, так и для поверхностных плазмонов) на угловое распределение интенсивности отраженного главного дифракционного пучка на фоне некогерентного упругого отражения.

2. ДВУХВОЛНОВАЯ ДИФРАКЦИЯ ПЕРЕД УПРУГИМ НЕКОГЕРЕНТНЫМ ОТРАЖЕНИЕМ. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТРАКТОВКА РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Дифракция Лауэ быстрого электрона рассматривается в двухволновом приближении [6]. Волновая функция, описывающая волновое поле быстрого дифрагирующего электрона, представляет собой суперпозицию двух блоховских волн:

$$\Psi^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{r}) = a_1 \exp(-i\varkappa_1 z - \mu_g z)[1 + b_1 \exp(-i\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\rho})] \times \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \mu_0 z), \quad (1)$$

которая распространяется так, что ее узлы располагаются на атомных плоскостях, а коэффициент поглощения для этой волны есть $\mu_0 + \mu_g$. Интенсивность этой волны затухает быстрее фоновой. И

$$\Psi^{(2)}(\mathbf{k},\mathbf{r}) = a_2 \exp(-i\varkappa_2 z + \mu_g z)[1 + b_2 \exp(-i\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\rho})] \times \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \mu_0 z), \quad (2)$$

которая распространяется так, что ее узлы лежат между атомными плоскостями, а коэффициент поглощения для этой волны есть $\mu_0 - \mu_g$. Интенсивность этой блоховской волны выше фоновой интенсивности.

Коэффициенты $\varkappa_1$ и $\varkappa_2$ определяются из равенства нулю определителя матрицы для определения собственных значений волнового вектора электрона в кристалле

$$\begin{vmatrix} k_1^2 - k^2 & U_{\mathbf{g}0} + iU'_g \\ U_{0\mathbf{g}} + iU'_g & k_1^2 - (\mathbf{k}-\mathbf{g})^2 \end{vmatrix} = 0.$$

Здесь

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_\rho + (k_z - \varkappa)\mathbf{n}_z, \quad U_{\mathbf{g}0} + iU'_g = \frac{2mV_\mathbf{g}}{\hbar^2}.$$

При всех последующих расчетах учет кристаллического поглощения на структуру дифракционных пучков оказывается несущественен, поэтому будем считать $\mu_g = 0$.

Так называемая проходящая волна представляет собой сумму части блоховских волн (1), (2) при $\mathbf{g} = 0$.

$$\psi_1(z) = a_1 \exp(-i\varkappa_1 z) + a_2 \exp(-i\varkappa_2 z). \quad (3)$$

Дифрагированная волна — есть сумма части решений (1), (2) при $\exp(-i\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\rho})$:

$$\psi_2(z) = \{a_1 b_1 \exp(-i\varkappa_1 z) + a_2 b_2 \exp(-i\varkappa_2 z)\}. \quad (4)$$

Коэффициенты a_i и b_i находятся из граничных условий. Учитывая все сказанное выше, волновая функция быстрого электрона в двухволновом приближении будет иметь следующий вид:

$$\Psi_D(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \mu_0 z)\{\psi_1(w,z,) + \psi_2(w,z,)\exp(-i\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\rho})\}. \quad (5)$$

Здесь

$$\psi_1(w,z,\mu_g) = \frac{\varkappa_2}{\varkappa_2-\varkappa_1}\exp(-i\varkappa_1 z) - \frac{\varkappa_1}{\varkappa_2-\varkappa_1}\exp(-i\varkappa_2 z), \quad (6)$$

$$\psi_2(w,z,\mu_g) = \frac{\sqrt{-\varkappa_1\varkappa_2}}{\varkappa_2-\varkappa_1} \times \left[\exp(-i\varkappa_2 z) - \exp(-i\varkappa_1 z)\right]. \quad (7)$$

Коэффициенты $\varkappa_1$ и $\varkappa_2$ определяются из уравнения

$$4\varkappa^2 k_z^2 - 2\varkappa k_z(2\mathbf{g}\cdot\mathbf{k}_\rho - \mathbf{g}^2) - U_g = 0.$$

Отсюда получим

$$\varkappa_{1,2} = \frac{2\mathbf{k}_\rho\cdot\mathbf{g} - \mathbf{g}^2}{4k_z} \mp \sqrt{\frac{(2\mathbf{k}_\rho\cdot\mathbf{g}-\mathbf{g}^2)^2}{16k_z^2} + \frac{U_g^2}{4k_z^2}}.$$

Коэффициенты $\varkappa_1$ и $\varkappa_2$ связаны с длиной экстинкции $\xi_g = \hbar v/|U_g|$ (v — скорость быстрого электрона) и углом отклонения от отражающего положения

$$\Delta\theta = \frac{\mathbf{k}_\rho^2 - (\mathbf{k}_\rho - \mathbf{g})^2}{2|\mathbf{k}||\mathbf{g}|}$$

следующими соотношениями

$$\varkappa_1\varkappa_2 = -\frac{1}{4\xi_g^2}, \quad \varkappa_1 + \varkappa_2 = |\mathbf{g}|\Delta\theta.$$

Для электронов средних энергий можно ввести параметр отклонения

$$w = |\mathbf{g}|\xi_{\mathbf{g}}(\sin\theta - \sin\theta_B).$$

Среднее по кристаллу (фоновое) затухание волнового поля μ_0 связано с мнимым потенциалом $\operatorname{Im} U_0$ соотношением

$$\mu_0 = \frac{\operatorname{Im} U_0}{\hbar v\cos\theta},$$

$\mathbf{g}$ — вектор обратной решетки, лежащий в плоскости поверхности кристалла. Величины $\varkappa_1$ и $\varkappa_2$ связаны с введенными параметрами соотношениями

$$\varkappa_1 = \frac{w - \sqrt{1+w^2}}{2\xi_{\mathbf{g}}\cos\theta}, \quad \varkappa_2 = \frac{w + \sqrt{1+w^2}}{2\xi_{\mathbf{g}}\cos\theta}.$$

Интенсивность электронного волнового поля в дифракционном пучке распределена в соответствии с $\psi_2(z)$ как

$$I_{\mathbf{g}}(z,w) = \left|\psi_2(z)\right|^2 = \frac{1 - \cos\left(\dfrac{\sqrt{1+w^2}z}{\xi_g}\right)}{2(1+w^2)}.$$

Тогда угловое распределение отраженного дифракционного пучка в канале упругого рассеяния можно просто оценить

$$I_{\mathbf{g},ref}(w) = R_{incoh.el}\frac{I_0}{\lambda_c}\int_0^\infty dz\exp\left(-\frac{z}{\lambda_c}\right)I_{\mathbf{g}}(z,w).$$

Здесь $R_{incoh.el}$ — коэффициент упругого некогерентного отражения электронов от монокристалла, λ_c — длина когерентности электронов в монокристалле, определяемая всеми упругими и неупругими столкновениями быстрого электрона в среде. По аналогии с предыдущей формулой можно получить оценочное угловое распределение отраженного дифракционного пучка в канале объемной плазменной потери энергии

$$I_{\mathbf{g},ref,pl}(w) = R_{incoh.el}\frac{I_0}{\lambda_c}\int_0^\infty dz\frac{z}{\lambda_{pl}} \times \exp\left(-\frac{z}{\lambda_c}\right)I_{\mathbf{g}}(z,w).$$

Здесь λ_{pl} — длина пробега быстрого электрона до акта испускания им объемного плазмона. Следовательно, нормированное на единицу при угле Брэгга ($w=0$) угловое распределение упругой дифракции на отражение, будет определяться лоренцевской формой линии

$$C_{ref,el}(w) = \frac{1}{1 + \dfrac{w^2}{1+\dfrac{\xi_g^2}{\lambda_c^2}}}.$$

Ширина линии на полувысоте составляет $\Delta w = 2\sqrt{1+\xi_g^2/\lambda_c^2}$. Нормированное на единицу при угле Брэгга угловое распределение неупругой дифракции на отражение уже не будет иметь лоренцевский вид, а будет определяться зависимостью

$$C_{ref,pl}(w) = \frac{1}{\left(1 + \dfrac{w^2}{1 + \dfrac{\xi_g^2}{\lambda_c^2}}\right)^2}.$$

Ширина линии на полувысоте для этой зависимости составляет

$$\Delta w = 2\sqrt{\sqrt{2} - 1}\sqrt{1 + \frac{\xi_g^2}{\lambda_c^2}}.$$

Отсюда следует, что дифракционный контраст неупругой дифракции в 1.55 раза выше контраста упругой дифракции. Такая трактовка результата эксперимента является феноменологической. Далее следует строгое теоретическое рассмотрение поставленной задачи.

В сценарии отражения дифракция учитывается трижды: первый раз — до излучения плазмона, второй раз — после излучения (в комплексно-сопряженной форме) и третий раз — перед упругим некогерентным рассеянием. Это касается амплитуды процесса рассеяния, когда плазмон излучается до акта упругого некогерентного рассеяния на центре. Для амплитуды процесса рассеяния, когда плазмон излучается после акта упругого некогерентного рассеяния на центре, дифракция учитывается только один раз — перед упругим некогерентным столкновением электрона с центром.

3. ВЕРОЯТНОСТЬ УПРУГОГО ОТРАЖЕНИЯ С ДИФРАКЦИЕЙ ЛАУЭ. ИНТЕНСИВНОСТЬ ДИФРАКЦИОННОГО ПУЧКА

Волновая функция процесса рассеяния на границе $z = 0$ имеет вид

$$\begin{aligned}
&\Psi(\boldsymbol{\rho}, z = 0) = \\
&= \int d\mathbf{r}_1 \Psi_D(\mathbf{k}, \mathbf{r}_1) V_{bs}(\mathbf{r}_1) G(\boldsymbol{\rho}, z = 0; \mathbf{r}_1) = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^6} \int_0^\infty dz_1 \int d\boldsymbol{\rho}_1 \Psi_D(\mathbf{k}, \mathbf{r}_1) \int d\mathbf{k}_a u_{bs}(\mathbf{k}_a) \times \\
&\times \sum_{l=1}^{N} \exp(-i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_l) \exp[i(\mathbf{k}_{a\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}_1 + k_{az} z_1)] \times \\
&\times \int d\mathbf{k}_{1\rho} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{1z} \frac{\exp[i\mathbf{k}_{1\boldsymbol{\rho}} \cdot (\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_1) - ik_{1z} z_1]}{E - E_{\mathbf{k}_{1\rho}} - E_{k_{1z}} + i\Gamma_0}. \quad (8)
\end{aligned}$$

Здесь $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ представляет собой функцию Грина быстрого электрона, описывающую состояние системы после упругого некогерентного рассеяния на центре,

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$$

— энергия быстрого электрона; $V_{bs}(\mathbf{r})$ — потенциал, описывающий упругое некогерентное рассеяние, Γ_0 — мнимая часть потенциала среды, N — число центров упругого рассеяния быстрого электрона, $u_{bs}(\mathbf{k}_a)$ — преобразование фурье-потенциала $V_{bs}(\mathbf{r})$. Остальные символы и обозначения совпадают с приведенными в предыдущем разделе. Обозначим

$$k'_z = \sqrt{k^2 - (\mathbf{k}_\rho + \mathbf{k}_{a\rho})^2}, \quad \frac{2mi\Gamma_0}{\hbar^2} = 2i\mu'_0 k'_z = 2i\mu_0 k_z,$$

$$\alpha_0 = \mu_0 + \mu'_0, \quad k'_{zg} = \sqrt{k^2 - (\mathbf{k}_\rho - \mathbf{g} + \mathbf{k}_{a\rho})^2}.$$

При вычислении вероятности выхода отраженных пучков необходимо выполнить усреднение по хаотическому распределению центров упругого некогерентного рассеяния. Это усреднение имеет вид

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{V} \int d\mathbf{r}_l \sum_{l=1}^{N} \sum_{l'=1}^{N} \exp[-i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_l - \mathbf{k}'_a \cdot \mathbf{r}_{l'})] = \\
&\qquad = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r}_l \sum_{l=l'=1}^{N} \exp[-i(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}'_a) \cdot \mathbf{r}_l] = \\
&\qquad\qquad = (2\pi)^3 n \delta(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}'_a). \quad (9)
\end{aligned}$$

Здесь $n = N/V$ — концентрация центров упругого некогерентного рассеяния.

Вероятность выхода представляется в виде суммы двух вероятностей для каждого из главных пучков. Введем феноменологический коэффициент разделения главных пучков R, который может быть оценен примерно, как

$$R = \frac{\int d\mathbf{k}_{a\rho} \Theta(|\mathbf{g}| - |\mathbf{k}_{a\rho}|) |u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_z - k'_z)|^2}{\int d\mathbf{k}_{a\rho} |u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_z - k'_z)|^2}.$$

Тогда вероятность выхода в дифракционном пучке будет равна

$$\begin{aligned}
P_2^{el} \approx \frac{m^2 n R}{\hbar^4 (2\pi)^2 k'^2_{zg}} \int d\mathbf{k}_{a\rho} |u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_z - k'_{zg})|^2 \times \\
\times \int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) |\Psi_2(z_1)|^2. \quad (10)
\end{aligned}$$

Вероятность попадания электрона в некогерентный фон упругого отражения после участия в процессе дифракции будет

$$P_{ph}^{el} = \frac{nm^2(1-R)}{2(2\pi)^2\hbar^4\alpha_0 k_z'^2} \times \\ \times \int d\mathbf{k}_{a\rho}|u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_z - k_{zg}')|^2. \quad (11)$$

Следовательно, угловая картина распределения дифракционного пучка относительно некогерентного фона при отражении электронов от монокристалла будет определяться так:

$$M^{el}(w) = \frac{P_2^{el}(w)}{P_{ph}^{el}} = \\ = -\frac{2R\varkappa_1\varkappa_2}{(1-R)[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4\alpha_0^2]}, \quad (12)$$

а угловое распределение главного дифракционного пучка, нормированное на единицу при угле Брэгга

$$C^{el}(w) = \frac{P_2^{el}(w)}{P_2^{el}(w=0)} = \frac{1}{1+\frac{w^2}{1+4\alpha_0^2\xi_g^2}}. \quad (13)$$

Это распределение в точности совпадает с аналогичным распределением, полученным в феноменологической трактовке с учетом того, что $\lambda_c = 1/2\alpha_0$.

4. АМПЛИТУДА ВЕРОЯТНОСТИ ПРОЦЕССА: ДИФРАКЦИЯ–УПРУГОЕ НЕКОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ НА БОЛЬШОЙ УГОЛ–ИЗЛУЧЕНИЕ ОБЪЕМНОГО ПЛАЗМОНА

Волновая функция рассматриваемого процесса (обозначим этот процесс символом «a») имеет вид

$$\Psi_a(\boldsymbol{\rho}, z=0) = -\frac{m^2\exp(i\mathbf{k}_\rho\cdot\boldsymbol{\rho})}{(2\pi)^5\hbar^4 k_z'^2} \times \\ \times \int d\mathbf{q}\exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho})\int d\mathbf{k}_{a\rho} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_{az}u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, k_{az})\sum_{l=1}^{N}\exp(-i\mathbf{k}_a\cdot\mathbf{r}_l) \times \\ \times \exp(i\mathbf{k}_{a\rho}\cdot\boldsymbol{\rho})\int_0^\infty dz_1\int_0^\infty dz_2\theta(z_1-z_2)A_{if}(z_2,\mathbf{q}) \times \\ \times \exp[-\alpha_0 z_1 + i(k_z+k_{az}+k_z')z_1] \times \\ \times \exp\left[-i\frac{(\omega+\mathbf{q}\cdot\mathbf{v}_\rho')}{v_z'}z_2\right]\psi_D(z_1,\boldsymbol{\rho}). \quad (14)$$

Здесь, как уже было сказано, потенциал упругого рассеяния представлен в виде фурье-преобразования. Амплитуда электрон-плазмонного рассеяния также представлена в виде фурье-преобразования по плоским координатам

$$\langle\Phi_f(\mathbf{R})|U_e(\mathbf{R},\mathbf{r}_2)\Phi_i(\mathbf{R})\rangle \equiv T_e(\mathbf{r}_2, i\to f) = \\ = \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\mathbf{q}A_{if}(z_2,\mathbf{q})\exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}_2).$$

Здесь $\Phi_i(\mathbf{R})$, $\Phi_f(\mathbf{R})$ — волновые функции электронов среды, принимающих участие в плазменных колебаниях.

Амплитуда вероятности процесса: дифракция–излучение объемного плазмона–дифракция–упругое некогерентное рассеяние на большой угол рассчитывается по аналогии с (14). Соответствующая такому процессу волновая функция (обозначим этот процесс символом «b») может быть найдена из последней формулы путем замены

$$v_z' \to -v_z, \quad \mathbf{v}_\rho' \to \mathbf{v}_\rho, \quad z_1 \to z_2.$$

Следовательно,

$$\Psi_b(\boldsymbol{\rho}, z=0) = -\frac{m^2\exp(i\mathbf{k}_\rho\cdot\boldsymbol{\rho})}{(2\pi)^5\hbar^4 k_z'^2} \times \\ \times \int d\mathbf{q}\exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho})\int d\mathbf{k}_{a\rho} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_{az}u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, k_{az})\sum_{l=1}^{N}\exp(-i\mathbf{k}_a\cdot\mathbf{r}_l) \times \\ \times \exp(i\mathbf{k}_{a\rho}\cdot\boldsymbol{\rho})\int_0^\infty dz_1\int_0^\infty dz_2\theta(z_2-z_1)A_{if}(z_1,\mathbf{q}) \times \\ \times \exp[-\alpha_0 z_2 + i(k_z+k_{az}+k_z')z_2] \times \\ \times \exp\left[i\frac{(\omega+\mathbf{q}\cdot\mathbf{v}_\rho)}{v_z}z_1\right] \times \\ \times \{\psi_1(z_2)+\exp(-i\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\rho})\psi_2(z_2)\}. \quad (14')$$

5. ВЕРОЯТНОСТЬ РЕГИСТРАЦИИ ДИФРАКЦИОННОГО ПУЧКА ПРИ ОТРАЖЕНИИ ЭЛЕКТРОНА ОТ МОНОКРИСТАЛЛА С ПОТЕРЕЙ ЭНЕРГИИ НА ИЗЛУЧЕНИЕ ОБЪЕМНОГО ПЛАЗМОНА

Рассмотрим сумму по всем конечным состояниям от произведения

$$\sum_f T_e(\mathbf{r}_1, i\to f)T_e^*(\mathbf{r}_2, i\to f).$$

Подставив фурье-преобразования электрон-плазмонных амплитуд, получим (см. [7])

$$\sum_f T_e(\mathbf{r}_1, i \to f) T_e^*(\mathbf{r}_2, i \to f) = \frac{1}{\pi(2\pi)^2} \int_0^\infty d\omega \times \\ \times \int d\mathbf{q} \,\mathrm{Im}\, D(\mathbf{q}, \omega, z_1, z_2) \exp[i\mathbf{q}\cdot(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2)]. \quad (15)$$

Здесь учитывалась пространственная однородность задачи в плоскости, параллельной поверхности; $D(\mathbf{q}, \omega, z_1, z_2)$ — функция Грина плазмонов в полубесконечной среде. Для нашего рассмотрения достаточно использовать бездисперсионное приближение для диэлектрической проницаемости кристалла. В этом случае, как известно [8]

$$D(q, \omega, z_1, z_2) = \frac{2\pi e^2 \hbar \theta(q_c - q)\theta(z_1)\theta(z_2)}{q\epsilon(\omega)} \times \\ \times [\exp(-q|z_1 - z_2|) - \exp[-q(z_1 + z_2)]] + \\ + \frac{4\pi e^2 \hbar \exp[-q(|z_1| + |z_2|)]}{q[1 + \epsilon(\omega)]}. \quad (16)$$

Первое слагаемое здесь соответствует вкладу от объемного плазмона, а второе — от поверхностного, $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$.

Вероятность выхода в дифракционном пучке будет получена с использованием формулы

$$P_2^{pl} = \frac{1}{2S} \int d\boldsymbol{\rho} \left|\Psi_a(\boldsymbol{\rho}, z = 0) + \Psi_b(\boldsymbol{\rho}, z = 0)\right|^2,$$

S — площадь поверхности. Мы не будем учитывать вклада интерференционного слагаемого в вероятность выхода, а ограничимся вкладом суммы квадратов модулей двух слагаемых. Учет интерференции процессов рассеяния с разной последовательностью упругого и неупругого столкновений рассматривался в работах [9, 10], в которых изучалось явление слабой локализации в поликристаллической среде с хаотическим распределением центров упругого некогерентного рассеяния. Там было показано, что при слабом электронном поглощении вклад интерференции мал по сравнению с вкладом суммы квадратов модулей.

Эта вероятность равна

$$P_2^{pl} = \frac{m^2 nR}{\hbar^4 (2\pi)^2 k'^2_{zg}} \int d\mathbf{k}_{a\rho} |u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_z - k'_{zg})|^2 \times \\ \times \int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) |\Psi_2(z_1)|^2 F_{pl}(z_1). \quad (17)$$

Здесь

$$F_{pl}(z_1) = \frac{\hbar}{2\pi a_B E_z} \int_0^\infty d\omega \,\mathrm{Im}\, \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \int_0^{q_c} dq \int_0^{z_1} dz_2 \times \\ \times \int_0^{z_1} dz_2' \left[\exp(-q|z_2 - z_2'|) - \exp(-q(z_2 + z_2'))\right] \times \\ \times \exp(iQ_z(z_2 - z_2')). \quad (18)$$

Эта функция представляет собой вероятность излучения объемного плазмона электроном на длине z_1 между поверхностью кристалла и координатой поворота при упругом некогерентном рассеянии на большой угол. Конкретный вид функции $F_{pl}(z)$ приведен в Приложении, q_c — волновой вектор коротковолновой «отсечки» плазменных колебаний.

Вероятность выхода электрона в некогерентном фоне при его отражении с потерей энергии $\hbar\omega_p$ будет

$$P_{ph}^{pl} = \frac{nm^2(1 - R)}{(2\pi)^2 \hbar^4 k'^2_{zg}} \int d\mathbf{k}_{a\rho} |u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_z - k'_{zg})|^2 \times \\ \times \int_0^\infty dz \exp(-2\alpha_0 z) F_{pl}(z). \quad (19)$$

Угловая картина распределения дифракционного пучка при отражении электронов от монокристалла с потерей энергии на излучение объемного плазмона, нормированная на единицу при угле Брэгга $w = 0$, будет

$$C^{pl}(w) = \int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) |\Psi_2(z_1, w)|^2 F_{pl}(z_1) \times \\ \times \left\{ \int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) \times \right. \\ \left. \times |\Psi_2(z_1, w = 0)|^2 F_{pl}(z_1) \right\}^{-1}. \quad (20)$$

Здесь координатный интеграл

$$I_{pl} = \int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) |\Psi_2(z_1)|^2 F_{pl}(z_1) \quad (21)$$

может быть переведен в импульсное представление (см. Приложение). Угловая картина распределения дифракционного пучка относительно некогерентного фона для энергии электрона $E - \hbar\omega_p$ будет

$$M^{pl}(w) = \\ = R\int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1)|\Psi_2(z_1,w)|^2 F_{pl}(z_1) \times \\ \times \left\{(1-R)\int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) F_{pl}(z_1)\right\}^{-1}, \quad (22)$$

при этом

$$\int_0^\infty dz_1 \exp(-2\alpha_0 z_1) F_{pl}(z_1) = \\ = \frac{\hbar\omega_p}{8a_B\alpha_0^2 E_z}\int_0^{q_c} dq\, q\left\{\frac{q+2\alpha_0}{(q+\alpha)(q^2+Q^2)} - \right. \\ \left. - \frac{2\alpha_0[q(q^2+Q^2+2q\alpha_0)+4\alpha_0 Q^2]}{(q^2+Q^2)^2[(q+2\alpha_0)^2+Q^2]}\right\}. \quad (23)$$

6. ВЕРОЯТНОСТЬ РЕГИСТРАЦИИ ДИФРАКЦИОННОГО ПУЧКА ПРИ ОТРАЖЕНИИ ЭЛЕКТРОНА ОТ МОНОКРИСТАЛЛА С ПОТЕРЕЙ ЭНЕРГИИ НА ИЗЛУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОНА

Построение волновой функции и расчет вероятности выхода электрона в дифракционном пучке практически аналогичны методикам, содержащимся в предыдущем разделе. Поэтому можно сразу определить искомую вероятность

$$P_2^{s.pl} = \frac{m^4 e^2 R}{\hbar^7 \pi (2\pi)^2 k_\omega^2 k'^2_{z\omega}} \times \\ \times \int d\mathbf{k}_{a\rho}|u_{bs}(\mathbf{k}_{a\rho}, -k_\omega - k'_{z\omega})|^2 \int_0^\infty d\omega\, \mathrm{Im}\,\frac{1}{1+\varepsilon(\omega)} \times \\ \times \int_0^\infty dq \int_0^\infty dz \exp(-2\alpha_0 z)|\Psi_2(z)|^2 \times \\ \times \left|\frac{1}{q+iQ} + \int_0^z dz_1 \exp(-qz_1 + iQz_1)\right|^2. \quad (24)$$

Угловое распределение выходящего отраженного дифракционного пучка нормированное на единицу при угле Брэгга вычисляется исходя из предыдущей формулы:

$$C^{s.pl}(w) = \int_0^\infty dq J_{s.pl}(q,w) \times \\ \times \left\{\int_0^\infty dq J_{s.pl}(q, w=0)\right\}^{-1}. \quad (25)$$

Конкретный вид функции $J_{s.pl}$ представлен в Приложении.

7. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Процесс излучения объемного плазмона должен уместиться на расстоянии от поверхности до поворота электрона при упругом некогерентном столкновении с центром. Сопоставление вероятностей, рассчитанных по формулам (13), (20), показывает, что излучение объемного плазмона вызывает увеличение длины области дифракционного поля. Это должно сказаться на ширине углового распределения дифракционного пучка в сторону его сужения по сравнению с угловой шириной пика упругой дифракции. Упругая дифракция закончилась бы ближе к поверхности в момент столкновения электрона с центром некогерентного рассеяния, чем неупругая с излучением объемного плазмона. Излучающийся плазмон затягивает процесс дифракции в более глубокие области кристалла, где дифракционное поле лучше сформировано. Чем у́же дифракционный пик, тем больше его высота над уровнем некогерентного фона. Приведенная аргументация полностью объясняет эксперимент [5]. Остается только пересчитать экспериментальные данные по приведенным выше формулам.

1. Полуширина на полувысоте дифракционного упругого пика составляет 8° или 0.14 рад. Представим знаменатель формулы (17) в явном виде:

$$1 + w^2 + 4\alpha_0^2\xi_g^2,$$

тогда полуширина на полувысоте будет соответствовать значению $|\mathbf{g}|\xi_g\Delta\theta = \sqrt{1+4\alpha_0^2\xi_g^2}$, откуда найдем, что

$$2\alpha_0\xi_g = \sqrt{|\mathbf{g}|^2\xi_g^2(\Delta\theta)^2 - 1} = \sqrt{\frac{4E_g E(\Delta\theta)^2}{U_g^2} - 1}.$$

Подставляя сюда значения $E = 400$ эВ, $U_g = 5.1$ эВ, $E_g = 15.5$ эВ, $\Delta\theta = 0.14$, получим $2\alpha_0\xi_g = 4.22$, т. е. длина экстинкции примерно в 4 раза превышает длину когерентности.

2. Для угла Брэгга (при $w = 0$) отношение высоты дифракционного максимума для упругой дифракции к величине некогерентного фона составляет в эксперименте

$$\left.\frac{\Delta A}{A - \Delta A}\right|_E = 0.45.$$

Аналогичное экспериментальное значение для дифракции с потерей $\hbar\omega_p$ составляет

$$\left.\frac{\Delta A}{A - \Delta A}\right|_{E-\hbar\omega_p} = 0.82.$$

Следовательно, отношение относительных высот дифракционных максимумов неупругой и упругой дифракций составляет

$$Y = \left.\frac{\Delta A}{A - \Delta A}\right|_{E-\hbar\omega_p} \left\{\frac{\Delta A}{A - \Delta A}|_E\right\}^{-1} = 1.82.$$

Теоретическое значение такого отношения представляет собой

$$Y = \frac{M^{pl}(w = 0)}{M^{el}(w = 0)}$$

и, если считать, что величина R для упругой и неупругой дифракции одинакова, то расчетное значение $Y = 2.47$. Из такого расчета следует, что доля превышения плазмонной глубины модуляции над упругой даже больше, чем это имеет место в эксперименте. Разница в значениях Y может быть связана с отличием значения R в упругом и плазмонном каналах дифракции.

3. Отношение ширин дифракционных максимумов для упругой и неупругой дифракции с объемным плазмоном на полувысоте составляет 1.66. Объемно-плазмонный дифракционный максимум является более узким. Этот результат расчета совпадает с экспериментальным результатом Кораблева [5]. Дифракционный максимум неупругой дифракции с поверхностным плазмоном лишь незначительно у́же углового распределения упругой дифракции. Поверхностный плазмон не растягивает область формирования дифракции, как это имеет место с объемным плазмоном. Незначительное сужение пика поверхностно-плазмонной дифракции по сравнению с упругим дифракционным пиком связано с пространственным убыванием поля поверхностного плазмона в глубь среды и связанным с этим некоторым небольшим перемещением области дифракции в глубь среды.

4. Анализ величины дифракционного контраста для двукратной характеристической потери на объемных плазмонах представляет собой самостоятельную задачу из-за увеличения числа сценариев протекания такого процесса электронного рассеяния. Можно только сказать, что вклад сценария процесса, когда первый плазмон излучается в дифракционном волновом поле до акта упругого некогерентного рассеяния, а второй плазмон излучается электроном, уже некогерентно рассеянным на большой угол, то в этом случае угловая модуляция будет аналогична таковой для процесса испускания одного объемного плазмона. Но для сценария процесса, когда оба плазмона испускаются после некогерентного рассеяния на центре, а до такого акта дифракция протекает по упругому каналу электронного волнового поля, то в этом случае процесс дифракции затягивается в глубь среды дальше, чем в случае испускания одного плазмона, и такой процесс имеет более узкую дифракционную угловую картину в дифракционном пучке. Поэтому угловая модуляция для двукратной потери на объемных плазмонах больше, чем для соседних энергий в спектре потерь. Получен важный результат, позволяющий идентифицировать характер однократной характеристической потери энергии электрона в монокристалле по угловой ширине дифракционного максимума:

1. Угловая ширина максимума объемной потери энергии в полтора раза у́же ширины максимума поверхностной потери энергии.

2. Угловая ширина дифракционного максимума упругой дифракции в 1.7 раза больше угловой ширины дифракционного максимума с энергией $E - \hbar\omega_p$.

Авторы благодарны В. Румянцеву за полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

$$F_{pl}(z) = \\ = \hbar\omega_p \left\{ z \left[\ln\left(1 + \frac{q_c^2}{Q_z^2}\right) + 2\mathrm{Ci}(Q_z z) \right] - \\ - \frac{\pi}{2Q_z} - \frac{2\sin(Q_z z) + \mathrm{f}(2Q_z z) - 2\cos(Q_z z)\mathrm{f}(Q_z z)}{Q_z} \right\} \times \\ \times (2a_B E_z)^{-1}.$$

Функция

$$\mathrm{f}(x) = \mathrm{Ci}(x)\sin(x) - \mathrm{si}(x)\cos(x);$$

$$\mathrm{si}(x) = -\int_x^\infty \frac{\sin(y)}{y} dy, \quad Q_z = \frac{\omega}{v};$$

$$\begin{aligned}
I_{pl}(q,w) = -\frac{2\hbar\omega_p\varkappa_1\varkappa_2}{8a_B\alpha_0^2E_z(\varkappa_2-\varkappa_1)^2}\int\limits_0^{q_c} dq\, q \times \\
\times\left\{\frac{q+2\alpha_0}{(q+\alpha_0)[(q+2\alpha_0)^2+Q^2]}+\right. \\
+\frac{8\alpha_0^2[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2(q+3\alpha_0)-4\alpha_0^2(q+\alpha_0)]}{[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4\alpha_0^2]^2[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4(q+\alpha_0)^2]}\times \\
\times\left[\frac{q+2\alpha_0}{(q+2\alpha_0)^2+(Q+\varkappa_2-\varkappa_1)^2}+\right. \\
\left.+\frac{q+2\alpha_0}{(q+2\alpha_0)^2+(Q-\varkappa_2+\varkappa_1)^2}\right]- \\
-\frac{4\alpha_0^2(\varkappa_2-\varkappa_1)[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2-4\alpha_0(2q+3\alpha_0)]}{[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4\alpha_0^2]^2[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4(q+\alpha_0)^2]}\times \\
\times\left[\frac{Q+\varkappa_2-\varkappa_1}{(q+2\alpha_0)^2+(Q+\varkappa_2-\varkappa_1)^2}-\right. \\
\left.\left.-\frac{Q-\varkappa_2+\varkappa_1}{(q+2\alpha_0)^2+(Q-\varkappa_2+\varkappa_1)^2}\right]\right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{s.pl}(q,w) = -2\varkappa_1\varkappa_2 \times \\
\times\Big\{2q^2/\alpha_0(q^2+Q^2)^2[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4\alpha_0^2]+ \\
+1/2(q^2+Q^2)(q+\alpha_0)[(\varkappa_2-\varkappa_1)^2+4(q+\alpha_0)^2]- \\
-4q^2(q+2\alpha_0)[(q+2\alpha_0)^2+ \\
+(\varkappa_2-\varkappa_1)^2-3Q^2]/(q^2+Q^2)^2\times \\
\times[(q+2\alpha_0)^2+Q^2][(q+2\alpha_0)^2+(Q-\varkappa_2+\varkappa_1)^2]\times \\
\times[(q+2\alpha_0)^2+(Q+\varkappa_2-\varkappa_1)^2]+ \\
+4qQ^2[3(q+2\alpha_0)^2-Q^2+(\varkappa_2-\varkappa_1)^2]/(q^2+Q^2)^2\times \\
\times[(q+2\alpha_0)^2+Q^2][(q+2\alpha_0)^2+(Q-\varkappa_2+\varkappa_1)^2]\times \\
\times[(q+2\alpha_0)^2+(Q+\varkappa_2-\varkappa_1)^2]\Big\}.
\end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. W. P. Ellis, Surf. Sci. **41**, 125 (1974).
2. S. K. Andersen and A. Howie, Surf. Sci. **50**, 197 (1975).
3. M. V. Gomoyunova, S. L. Zaslavskii, and I. I. Pronin, Sov. Phys. Sol. St. **20**, 2106 (1978).
4. V. V. Korablev and A. A. Maiorov, Sov. Tech. Phys. Lett. **4**, 505 (1978).
5. V. V. Korablev, A. A. Maiorov, V. V. Rumyantsev et al., Sov. Phys. Tech. Phys. **25**(1), 109 (1980).
6. J. M. Cowley, Diffraction Physics, NHPC Amsterdam Oxford (1975), p. 176.
7. V. V. Rumyantsev and B. N. Libenson, Sov. Phys. JETP **60**(5), 1046 (1984).
8. V. V. Rumyantsev and B. N. Libenson, Sov. Phys. JETP **56**(1), 135 (1982).
9. B. N. Libenson, K. Yu. Platonov, and V. V. Rumyantsev, Sov. Phys. JETP **74**(2), 326 (1992).
10. B. N. Libenson, Phys. Sol. St. **49**(1), 55 (2007).