

УДК 548.47

КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В ТОНКОЙ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ ПРИ СРЕДНЕЙ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ

© 2022 г. С. М. Шкорняков*

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, 119333 Россия

*e-mail: shkorniyakov@mail.ru

Поступила в редакцию 02.06.2021 г.

После доработки 19.08.2021 г.

Принята к публикации 24.08.2021 г.

Проведен расчет коэффициентов отражения и прохождения электронов средней энергии при их нормальном падении на тонкую монокристаллическую пленку. Определены энергетические интервалы между дифракционными максимумами на кривой отражения электронов. Показано, что при средних значениях энергии частиц проявляется заметный квантовый размерный эффект для блоховских волн, формирующихся в монокристаллической пленке. Его проявления достаточны для экспериментального наблюдения как на кривых отражения, так и на кривых прохождения. Предложены различные схемы эксперимента. Таким образом, указана возможность наблюдения эффекта не только в случае электронов низкой энергии (5–20 эВ), что было известно ранее, но и в случае частиц средней энергии (10–20 кэВ).

Ключевые слова: квантовый размерный эффект, дифракция электронов, тонкие монокристаллические пленки, эпитаксия, поверхность роста.

DOI: 10.31857/S1028096022020121

ВВЕДЕНИЕ

Проявления квантового размерного эффекта в прямоугольной потенциальной яме были известны давно, начиная с зарождения квантовой механики. Вскоре они получили экспериментальное подтверждение – так называемый эффект Рамзауэра. В дальнейшем эффект наблюдался и при исследовании тонких пленок [1]. В работе теоретически исследуется квантовый размерный эффект в тонких монокристаллических пленках при средних значениях энергии падающих частиц, т.е. порядка 10 кэВ.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В качестве электростатического потенциала в монокристаллической пленке выбрана одномерная модель из периодической гребенки δ -функций со скачками потенциала на краях пленки, отражающего учет среднего внутреннего потенциала в кристалле (рис. 1). Гребенка моделирует сечение плоскостей пленки, параллельных ее поверхности.

Аналитически потенциальная энергия электрона в решетке задается следующим уравнением:

$$V(x) = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} cU \sum_1^N \delta(x - c(n-1))$$

$$\text{для } \frac{c}{2} \leq x \leq cN - \frac{c}{2}, \quad V(x) = 0$$

$$\text{для } x < -\frac{c}{2}, x > cN - \frac{c}{2}.$$

Здесь c – период одномерной решетки, N – число периодов в ней, $V_0 > 0$ – высота потенциальной ступеньки на границах пленки, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, $U = 2\pi\mu/c^2$ – “мощность” потенциала, μ – безразмерный параметр модели, \hbar – постоянная Планка, m – масса электрона.

Значение параметра μ варьируется от $-1/2$ до -2 . При этих значениях ширина запрещенной зоны порядка единиц эВ [2]. Решение уравнения Шредингера с приведенным выше потенциалом было проведено в [3]. Из него следует, что коэффициент отражения от пленки T равен:

$$T = tt^* = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a} \right)^2 \sin^2 \mu c N} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda}{k} \operatorname{tg} \frac{kc}{2} \operatorname{ctg} \frac{\mu c}{2} - \frac{k}{\lambda} \operatorname{ctg} \frac{kc}{2} \operatorname{tg} \frac{\mu c}{2} \right)^2 \sin^2 \mu c N},$$

где модуль блоховского волнового вектора μ определяется из уравнения дисперсии

$$\cos \mu c = \cos kc + \frac{cU}{2k} \sin kc,$$

k – модуль волнового вектора свободного электрона,

$$\lambda = \pi \sqrt{0.0268 E_1}, \quad k = \pi \sqrt{0.0268 (E_1 + V_0)},$$

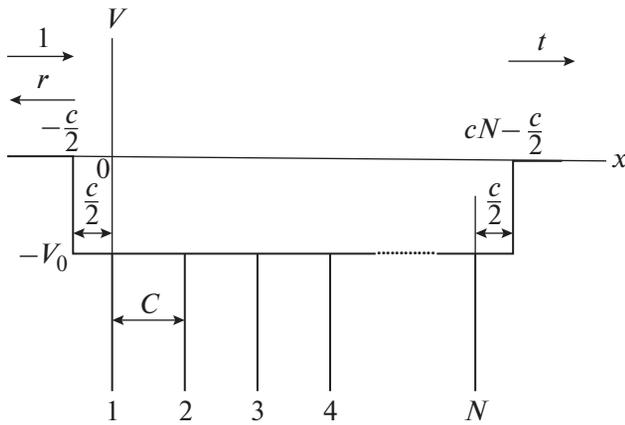


Рис. 1. Потенциальная энергия электрона в пленке.

где $E_1 = \left(\sin^2 \frac{\alpha\pi}{180} \right) E$ – нормальная составляющая энергии электронов E падающего пучка [эВ], V_0 – величина потенциального скачка на границах пленки [эВ], α – угол скольжения [град], λ и k – модули волновых векторов [Å^{-1}]. Коэффициент отражения $R = 1 - T$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2а приведена кривая зависимости коэффициента отражения от энергии падающих электронов в широком энергетическом диапазоне при количестве периодов решетки $N = 60$. Наблюдаются узкие дифракционные пики, разделенные значительными промежутками значений энергии. Как следует из уравнения дисперсии, промежутки между пиками подчиняются закону $\Delta E \sim E^{1/2}$, т.е. с повышением энергии расстояния между пиками медленно увеличивается. При увеличении масштаба по оси ординат видны колебания интенсивности отраженного пучка – проявления квантового размерного эффекта (рис. 2б). Эти осцилляции могут быть зафиксированы экспериментально.

На рис. 3 $N = 80$, т.е. исследуется монокристаллическая пленка толщиной 400 Å. Диапазон значений энергии тот же. Видим, что интенсивность отраженных дифракционных рефлексов увеличивается. Как и в предыдущем случае, проявляется квантовый размерный эффект (рис. 3б).

И, наконец, рассмотрим случай $N = 100$ (рис. 4). Еще больше увеличивается интенсивность дифракционных отражений. На рис. 4б по оси орди-

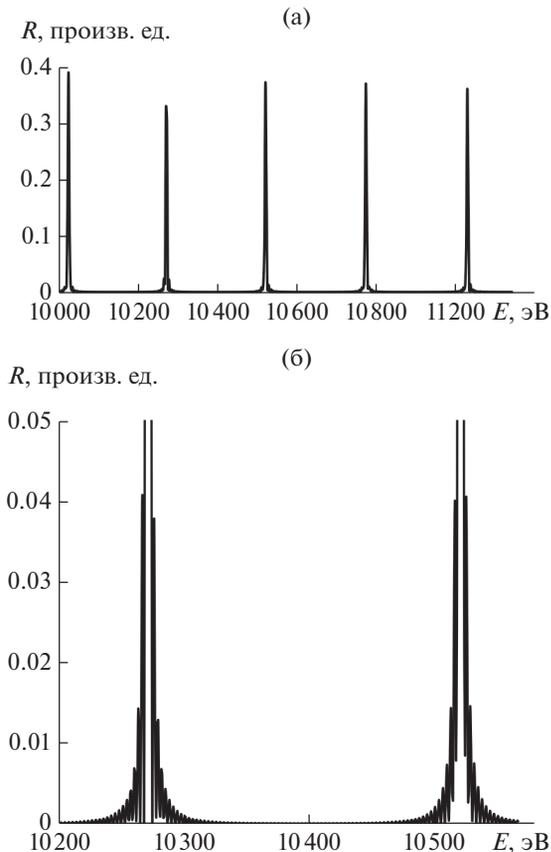


Рис. 2. Коэффициент отражения R для $V_0 = 10$ эВ, $y = -1$, $N = 60$, $\alpha = 90^\circ$: а – $E = 10000-11300$ эВ, $R = 0-0.5$; б – $E = 10200-10600$ эВ, $R = 0-0.03$.

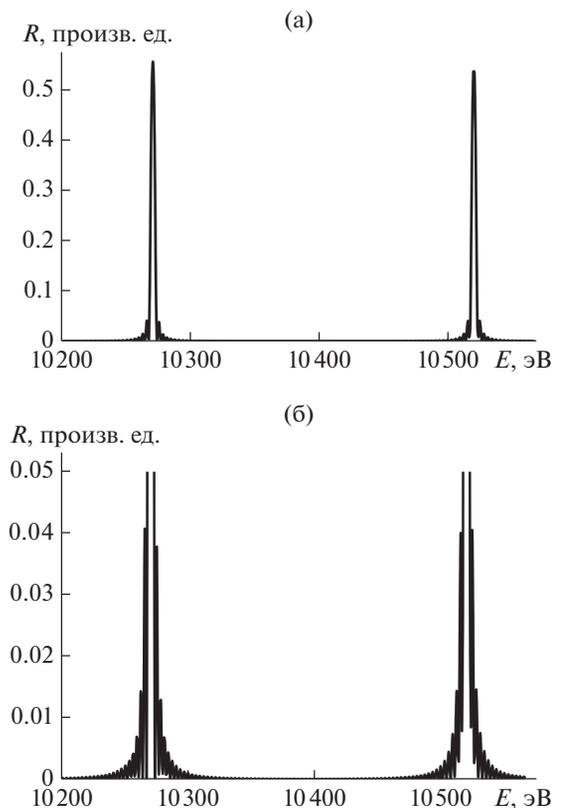


Рис. 3. Коэффициент отражения R для $V_0 = 10$ эВ, $y = -1$, $N = 80$, $\alpha = 90^\circ$, $E = 10200-10600$ эВ: а – $R = 0-0.6$; б – $R = 0-0.05$.

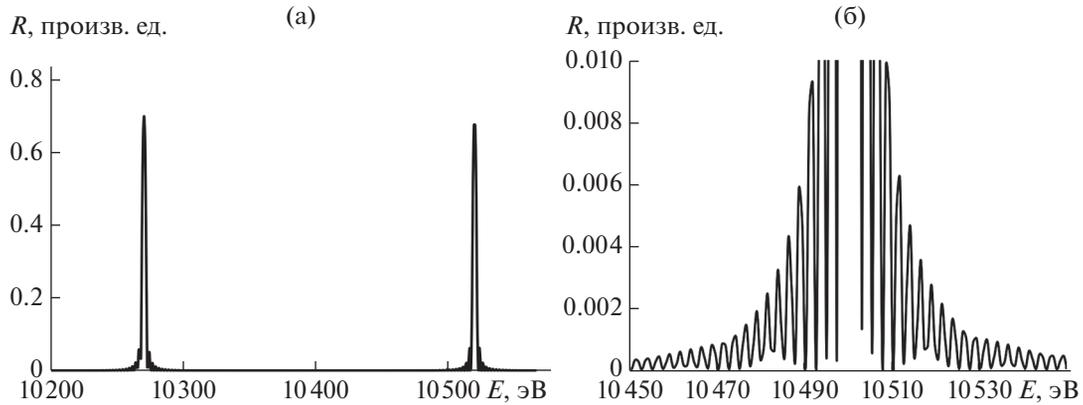


Рис. 4. Коэффициент отражения R для $V_0 = 10$ эВ, $y = -1$, $N = 100$, $\alpha = 90$, $E = 10200-10600$ эВ: а – $R = 0-0.8$; б – $R = 0-0.01$.

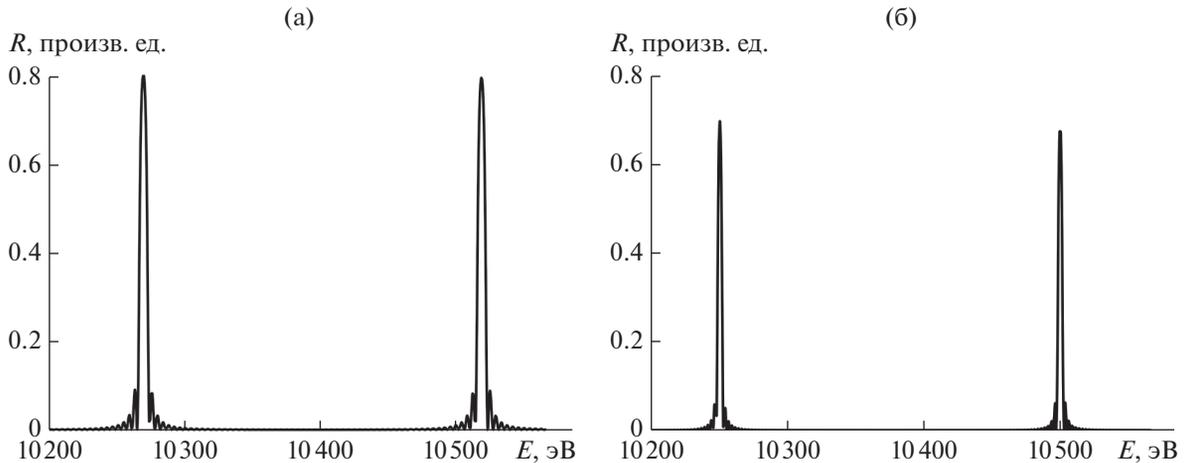


Рис. 5. Коэффициент отражения R для $y = -1$, $N = 100$, $\alpha = 90^\circ$, $E = 10200-10600$ эВ: а – $V_0 = 10$ эВ, $R = 0-0.8$; б – $V_0 = 30$ эВ, $R = 0-0.8$.

нат и по оси абсцисс взят крупный масштаб, чтобы четче выявить квантовый размерный эффект. Число максимумов между любой парой дифракционных рефлексов в этом случае равно 98.

На рис. 5 приведен результат расчета для двух различных значений среднего внутреннего потенциала. Наблюдается небольшой сдвиг положения резонансных пиков. В остальном же картина не меняется.

На рис. 6 проведен расчет для трех различных значений отражательной способности кристаллографических плоскостей решетки, т.е. для трех значений параметра y . Толщина пленки 300 Å, средняя внутренняя энергия кристалла 10 эВ. Видно, что с ростом абсолютного значения y увеличивается отражение от пленки.

На рис. 7 приведены зависимости коэффициентов отражения и прохождения в разных диапазонах значений, рассчитанные в случае: $V_0 = 10$ эВ, $N = 60$, $y = -2$, $E = 10200-10600$ эВ. Из рисунка следует,

что квантовый размерный эффект заметен и может наблюдаться экспериментально как при измерении R , так и T .

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ СПОСОБЫ НАБЛЮДЕНИЯ ЭФФЕКТОВ

Обсудим возможные методы экспериментального наблюдения предсказанных эффектов. Так как потенциал образца обычно находится “на земле”, его можно изолировать и подать на него положительное или отрицательное напряжение. В этих случаях, варьируя его, получим кривые $R(E)$ или $T(E)$, измеряя соответствующую интенсивность пучка. Пленку не обязательно брать свободную, можно исследовать ее прямо на подложке при измерении отражения $R(E)$. Для получения зависимости $T(E)$ это, конечно, невозможно. В этом случае придется отделять пленку от подложки, как это обычно происходит в элек-

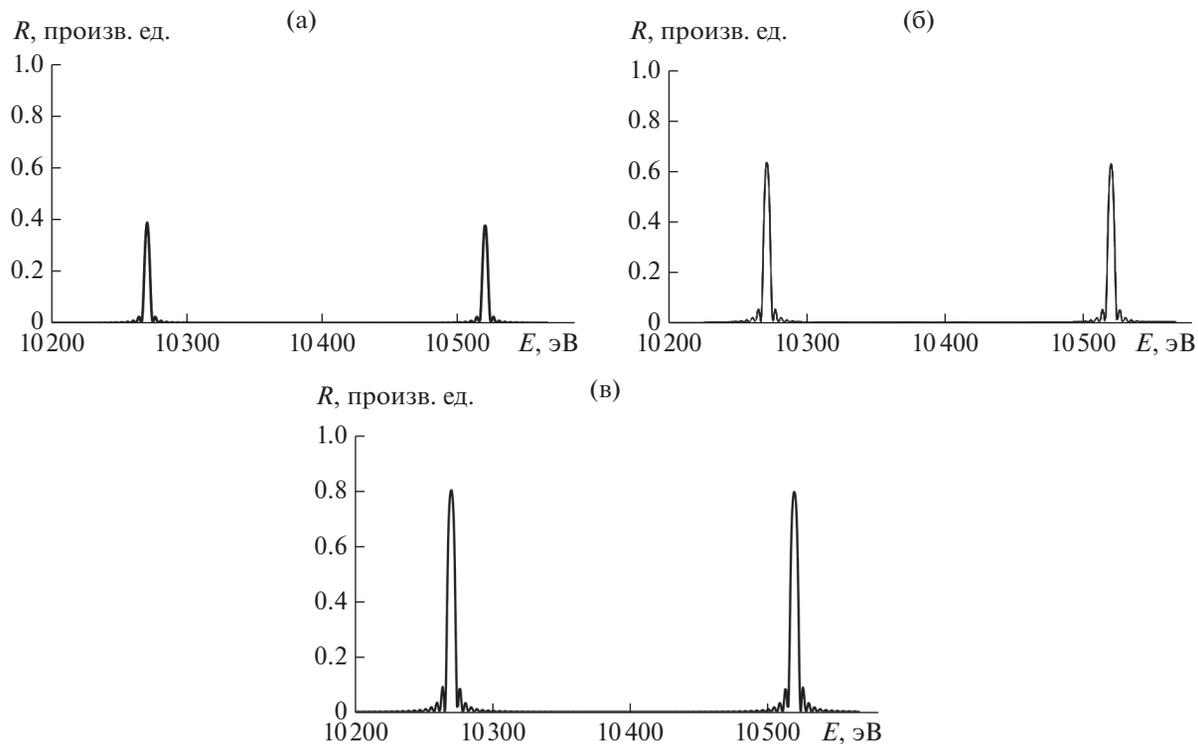


Рис. 6. Коэффициент отражения R для $V_0 = 10$ эВ, $N = 60$, $\alpha = 90^\circ$, $E = 10200\text{--}10600$ эВ: а – $y = -1$, $R = 0\text{--}0.8$; б – $y = -3/2$, $R = 0\text{--}1$; в – $y = -2$, $R = 0\text{--}1$.

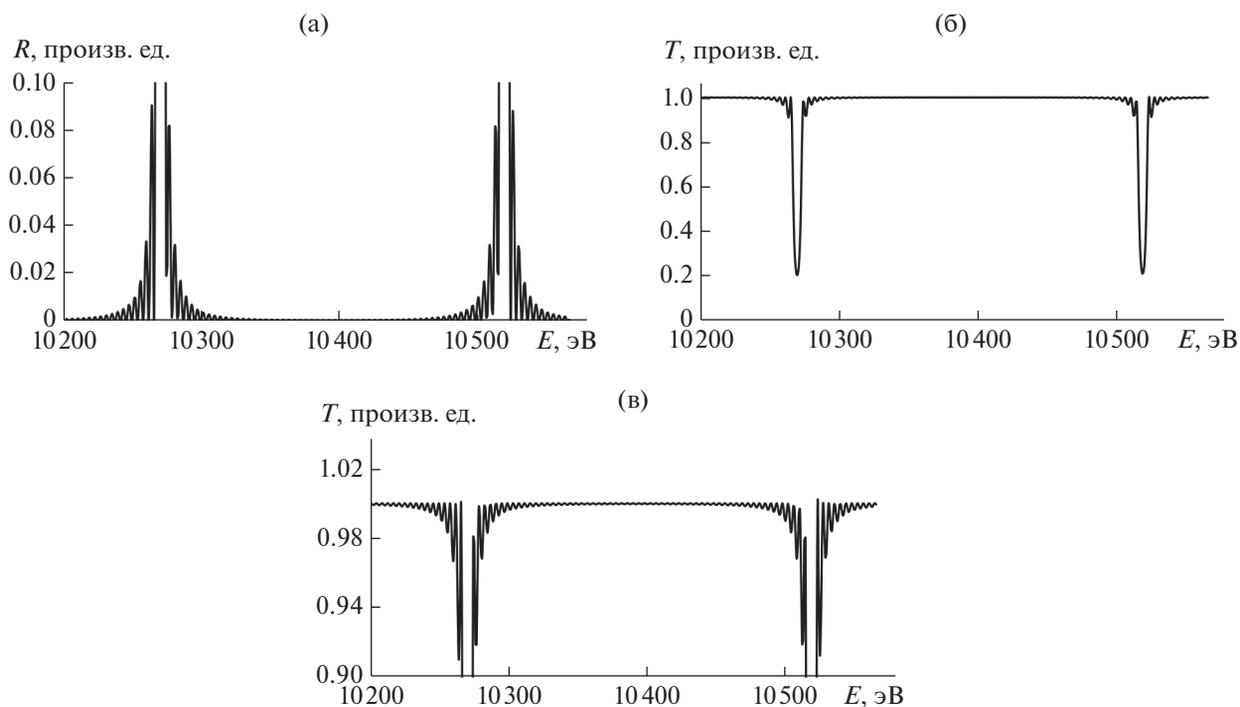


Рис. 7. Коэффициенты отражения R и прохождения T для $V_0 = 10$ эВ, $y = -2$, $N = 60$, $\alpha = 90^\circ$, $E = 10200\text{--}10600$ эВ: а – $R = 0\text{--}0.1$; б – $T = 0\text{--}1.1$; в – $T = 0.9\text{--}1.05$.

тронной микроскопии или электронографии, либо проделывать отверстие в подложке.

Методы получения тонких монокристаллических пленок достаточно разработаны, и можно применять последние достижения в этой области [4–8]. Материал пленки может быть любым, но лучше брать полупроводник или металл, которые не заряжаются под пучком.

Для проведения экспериментов особенно удобен разработанный сравнительно недавно метод дифракции обратно рассеянных электронов [9]. Дифракционные картины в режиме обратно рассеянных электронов впервые были зарегистрированы в 1928 г. Нишикавой и Кикучи на том же образце, на котором были получены картины дифракции Кикучи методом просвечивающей электронной микроскопии в режиме детектирования прошедших электронов [10].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены вычисления коэффициентов отражения и прохождения электронов, падающих нормально на тонкую монокристаллическую пленку. Показано, что в довольно широких интервалах энергии отражение мало. Положение пиков отражения подчиняется закону $\Delta E \sim E^{1/2}$. Ранее были предсказаны и предложены способы экспериментального наблюдения квантового размерного эффекта для электронов средней и высокой энергии, падающих на пленку под малым углом скольжения [3, 11–13]. Благодаря такой геометрии нормальная составляющая энергии частиц была порядка 10 эВ. Из-за этого условия наблюдения квантового размерного эффекта становились благоприятными. В настоящей работе по-

казано, что и при нормальном падении пучка средней энергии, когда условия для наблюдения эффекта не совсем благоприятны, квантовый размерный эффект проявляется, может наблюдаться и быть измерен экспериментально.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Change L.L., Esaki L., Tsu R.* // Appl. Phys. Lett. 1974. V. 24. P. 593.
2. *Saxon D.S., Hutner R.A.* // Philips Res. Rep. 1949. V. 4. № 2. P. 81.
3. *Шкорняков С.М.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 2. С. 99. <https://doi.org/10.7868/S020735281211011X>
4. *Латышев А.В., Ацев А.Л.* // УФН. 1998. Т. 168. № 10. С. 1117.
5. *Rogilo D.I., Fedina L.I., Kosolobov S.S., Ranguelov B.S., Latyshev A.V.* // Phys. Rev. 2013. V. 111. P. 036105.
6. *Рогило Д.И., Федина Л.И., Косолюбов С.С., Латышев А.В.* // Вестн. НГУ. Сер. Физика. 2014. Т. 9. Вып. 2. С. 156.
7. *Sitnikov S., Kosolobov S., Latyshev A.* // Surf. Sci. 2015. V. 633. P. L1.
8. *Sitnikov S., Latyshev A., Kosolobov S.* // J. Cryst. Growth. 2017. V. 457. P. 196.
9. *Schwartz A.* Electron Backscatter Diffraction in Materials Science / Ed. Schwartz A. et al. N.Y.: Springer, 2009. 403 p.
10. *Nishikawa S., Kikuchi S.* // Nature. 1928. V. 121. № 3061. P. 1019.
11. *Шкорняков С.М.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2002. № 9. С. 6.
12. *Шкорняков С.М.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2017. № 6. С. 83. <https://doi.org/10.7868/S020735281706018X>
13. *Шкорняков С.М.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2019. № 2. С. 74. <https://doi.org/10.1134/S0207352819020124>

Quantum Size Effect in a Thin Single-Crystal Film at Average Electron Energies

S. M. Shkorniyakov*

Shubnikov Institute of Crystallography, FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, 119333 Russia

**e-mail: shkorniyakov@mail.ru*

The calculation of the reflection and transmission coefficients of average-energy electrons at their normal incidence on a thin single-crystal film is carried out. The energy intervals between the diffraction maxima on the electron reflection curve are determined. It is shown that, at average particle energies, a noticeable quantum size effect is manifested for Bloch waves formed in a single-crystal film. Its manifestations are sufficient for experimental observation both on the reflection and transmission curves. Various experimental schemes are proposed. Thus, the possibility of observing the effect is indicated not only in the case of low-energy electrons (5–20 eV), which was known earlier, but also in the case of particles of average energy (10–20 keV).

Keywords: quantum size effect, electron diffraction, thin single-crystal films, epitaxy, growth surface.