

УДК 537.533.74

Влияние многократного упругого рассеяния быстрых электронов золотом на спиновое состояние электрона. Стожаров В.М., Плисс Н.С., Малышев С.А., Лебедев А.О. // Научное приборостроение. Физика аналитических приборов. - Л.: Наука, 1989. - С.40-45.

Разработан метод расчета функции асимметрии многократного упругого рассеяния быстрых электронов в тонких пленках золота. Проведено исследование оптимальных условий расчета. Показана зависимость асимметрии многократного рассеяния электронов от толщины пленки золота. Рассчитаны толщинные зависимости относительных

вкладов рассеянных с разной кратностью электронов в общее число упруго рассеянных электронов. Лит. - 10 назв., ил. - 4.

## ВЛИЯНИЯ МНОГОКРАТНОГО УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ЗОЛОТОМ НА СПИНОВОЕ СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА

Закономерности упругого рассеяния быстрых электронов с энергиями от 10 до 120 кэВ поверхностью твердого тела определяются особенностями однократного упругого рассеяния электронов отдельными атомами [1]. Благодаря этому их угловое распределение близко к дифференциальному сечению упругого рассеяния электронов, хорошо известному из теоретических и экспериментальных исследований [2].

Согласно современным представлениям упругое рассеяние электрона атомами строго подчиняется закону Резерфорда только в случае рассеяния электронной волны в чисто кулоновском поле ядра [3]. В центрально-симметричном поле реального атома закон рассеяния, близкий к резерфордовскому, является следствием первого борновского приближения, границы применимости которого в зависимости от энергии первичных электронов  $E_p$  и порядкового номера  $Z$  элемента мишени определяются

оценочными соотношениями [1]:

$$\begin{cases} E_p \ll 30 \text{ эВ} \\ E_p \gg E_{кр} = 13,4 \lambda^2 \text{ эВ.} \end{cases}$$

Из этих соотношений следует, что рассеяние быстрых электронов золотом должно иметь характер малуглового резерфордского рассеяния и согласно современной квантовомеханической теории рассеяния рассчитываться на основе первого борновского приближения.

Значительное усложнение теории рассеяния электронов связано с учетом собственного механического момента электрона  $\vec{S}$ , обладающего свойствами квантовомеханического момента и называющегося спином. Поскольку электрон обладает отрицательным зарядом, наличие у него механического момента должно привести к возникновению собственного магнитного момента  $\vec{\mu}_S$ , связанного с моментом  $\vec{S}$  соотношениями:

$$\mu_S = \frac{e}{mc} \vec{S}, \quad (1)$$

где  $e$  – заряд электрона;  $m$  – масса электрона;  $c$  – скорость света. С другой стороны из фазовой теории рассеяния [3] хорошо известно, что рассеяние электрона, сопровождающееся в результате инфинитного движения искривлением его траектории, приводит к возникновению на криволинейном участке траектории орбитального квантовомеханического момента  $\vec{L}$  и также связанного с ним  $\vec{\mu}_L$ . Взаимодействие магнитных моментов электрона – спинового  $\vec{\mu}_S$  и  $\vec{\mu}_L$ , так называемое спин-орбитальное взаимодействие, влияет на траекторию рассеянного электрона и является причиной появления асимметрии рассеяния электронных пучков в чистом или смешанном спиновом состоянии [3, 4]. В теории асимметрия рассеяния в чистом спиновом состоянии описывается функцией Шермана  $S(\theta)$ , которая определяется следующим соотношением [2-4]:

$$S(\theta) = \frac{I_{np}(\theta) - I_{лев}(\theta)}{I_{np}(\theta) + I_{лев}(\theta)}, \quad (2)$$

где  $I_{np}(\theta)$  и  $I_{лев}(\theta)$  – дифференциальные сечения рассеяния на  $\theta$  электронов в чистом спиновом состоянии направо и налево, соответственно.

В работе [5] приведены подробные таблицы теоретически рассчитанных основных параметров ( $I(\theta)$  и функции Шермана  $S(\theta)$ ) упругого рассеяния электронов для золота и ртути в широкой области энергий от 0,2 до 290 кэВ.

Свойство асимметрии упругого рассеяния поляризованных электронов, находящихся в чистом или смешанном спиновом состоянии, используется в детекторе Мотта для измерения степени поляризации электронов [6]. Принцип работы детектора Мотта состоит в измерении асимметрии упругого рассеяния поляризованных электронов атомами тяжелых веществ. Наиболее распространенным типом моттовского детектора является детектор, принцип действия которого основан на обратном упругом отражении поляризованных электронов на  $\theta = 120^\circ$  от тонкой пленки золота при нормальном падении  $E_p = 100$  кэВ (рис.1): 1 – правый электрометр, 2 – левый электрометр, 3 – тонкая свободная пленка золота. Степень поляризации  $P$  анализируемых электронов вычисляется по формуле [6]

$$P = \frac{1}{S} \frac{i_1 - i_2}{i_1 + i_2}, \quad (3)$$

где  $S$  – функция Шермана из таблиц работы [5]:  $i_1$  и  $i_2$  – токи упруго рассеянных электронов, измеренные соответственно правым и левым электрометрами.

Формулы (2) и (3), верны в том случае, когда обратное рассеяние электронов обусловлено только однократными актами упругого моттовского рассеяния атомами

пленки. Согласно формуле (1):

$$L = 1/\sigma n_0, \quad (4)$$

связывающей среднюю длину свободного пробега  $L$  электрона относительно упругого рассеяния на атоме с полным сечением упругого рассеяния  $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$  и плотностью рассеивающих атомов  $n_0$ , это условие при  $E_p = 100$  кэВ и  $\theta = 120^\circ$  выполнимо для свободных пленок золота толщиной менее  $50 \text{ \AA}$  [7], практическое изготовление которых затруднительно. В реальных пленках толщиной  $200 \text{ \AA}$  и более наряду с однократным рассеянием присутствует многократная компонента упругого рассеяния электронов, уменьшающая асимметрию рассеяния и требующая учета ее влияния на функцию Шермана. В этом случае формула для вычисления степени поляризации электронов изменится:

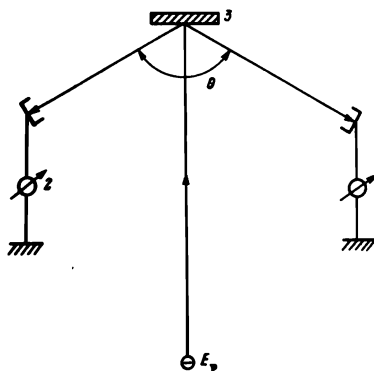


Рис.1. Схема детектора Мотта

$$\rho = \frac{1}{S'} \frac{i_1 - i_2}{i_1 + i_2},$$

где  $S'$  — функция асимметрии многократного упругого рассеяния электронов в чистом спиновом состоянии.

В статье сделана попытка теоретического расчета функции асимметрии  $S'(\theta)$  методом вычислительного эксперимента с целью исследования влияния многократного упругого рассеяния быстрых электронов с энергиями от 25 до 121 кэВ пленками золота разной толщины на функцию Шермана.

В работах [8, 9] сделана попытка учета влияния на функцию Шермана многократного рассеяния электронов чисто экспериментальным путем с помощью построения толщинных зависимостей асимметрии рассеяния. Несмотря на низкую точность таких экспериментов они показали важность учета многократного рассеяния, благодаря которому функция Шермана в толстых пленках золота (толщиной более 1000  $\text{ \AA}$ ) уменьшается в 1,5–2 раза.

#### Методика расчета

Многократное упругое рассеяние электронов в пленках золота различной толщины от 0 до 2000  $\text{ \AA}$  и в области энергий от 25 до 121 кэВ с высокой степенью точности аппроксимируется моделью парных столкновений [2, 10], основанной на представлении многократного рассеяния как результата ряда независимых однократных упругих столкновений электронов с отдельными атомами пленки по законам однократного упругого рассеяния [5]. Благодаря этому задача расчета влияния компоненты многократного упругого рассеяния на функцию Шермана распадается на две независимые задачи: расчет парциальных функций асимметрии упругого рассеяния электронов с  $i$ -й кратностью и расчет относительных вкладов упруго рассеянных с разной кратностью электронов в общее количество упруго рассеянных электронов.

Целью расчета является вычисление для фиксированного угла  $\theta$  функции асимметрии многократного упругого рассеяния электронов в чистом спиновом состоянии  $S'(\theta)$ . Функция  $S'(\theta)$  рассчитывается по обобщенной формуле:

$$S'(\theta) = \sum_{i=1}^n \delta_i(\theta) A_i(\theta),$$

где  $\delta_i(\theta)$  – относительный вклад упруго рассеянных с кратностью  $i$  электронов на  $\theta$  в общее количество упруго рассеянных электронов;  $A_i$  – парциальная функция асимметрии упругого рассеяния электронов с  $i$ -й кратностью, на  $\theta$ .

Расчет парциальных функций асимметрии упругого рассеяния электронов производится согласно тривиальному соотношению:

$$A_i(\theta) = (I_i^{np} - I_i^{лев}) / (I_i^{np} + I_i^{лев}),$$

где  $I_i^{np}$  и  $I_i^{лев}$  – интенсивности электронного потока,  $i$ -кратно рассеянного упруго на  $\theta$ , направо и налево, соответственно. Величины  $I_i^{np}$  и  $I_i^{лев}$  определяются суммой интегралов, учитывающих все возможные траектории многократного рассеяния электронов при условии попадания их в конце пути в детектор под углом рассеяния  $\theta$ . Для наиболее простого случая двухкратного рассеяния величина  $I_i^{np}$  определяется следующей суммой интегралов (рис.2):

$$I_2^{np}(\theta) = \int_0^\theta I_{np}(\theta') I_{np}(\theta - \theta') d\theta' + \int_0^\pi I_{np}(\theta') I_{лев}(\theta' - \theta) d\theta' + \int_0^\pi I_{лев}(\theta') I_{np}(\theta' + \theta) d\theta' + \int_{\pi-\theta}^\pi I_{лев}(\theta') I_{лев}(\theta' - \pi + \theta) d\theta'. \quad (5)$$

Эта формула описывает двухкратное рассеяние электронов в правый детектор (направление "0"), изображенное на рис.2: 1 – направление первого рассеяния, приводящего к двухкратному рассеянию в правый детектор, которое описывается первым интегралом формулы (5); 2 – направление первого рассеяния, приводящего к двухкратному рассеянию в правый детектор, которое описывается вторым интегралом формулы (5); 3 – направление первого рассеяния, приводящего к двухкратному рассеянию в правый детектор, которое описывается третьим интегралом формулы (5); 4 – направление первого рассеяния, приводящего к двухкратному рассеянию в правый детектор, которое описывается четвертым интегралом формулы (5). Заменяя в подынтегральных выражениях величины  $I_{np}(\theta')$  на величины  $I_{лев}(\theta')$  и изменяя соответствующим образом пределы интегрирования, нетрудно аналогичным образом построить алгоритм вычисления величины  $I_2^{лев}(\theta)$ .

Входящие в подынтегральные выражения величины  $I_{np}(\theta')$  и  $I_{лев}(\theta')$  имеют смысл интенсивностей электронного потока, однократно рассеянного на угол  $\theta'$  направо и налево, соответственно, и рассчитываются по формулам

$$I_{np}(\theta') = I(\theta') [1 - S(\theta')], \quad (6)$$

$$I_{лев}(\theta') = I(\theta') [1 + S(\theta')], \quad (7)$$

где  $I(\theta')$  – дифференциальное сечение рассеяния на  $\theta'$ ;  $S(\theta')$  – функция Шермана при рассеянии на  $\theta'$  (см.таблич.данные работы [5]).

Для трех и более кратных рассеяний необходимо перебрать последовательно все возможные варианты рассеяний вправо и влево, приводящие в конечном итоге к рассеянию на заданный угол  $\theta$  и рассчитать соответствующие интегралы, кратность которых равна кратности рассеяния, с учетом формул (6) и (7).

По описанным алгоритмам разработана программа, позволяющая рассчитывать пар-

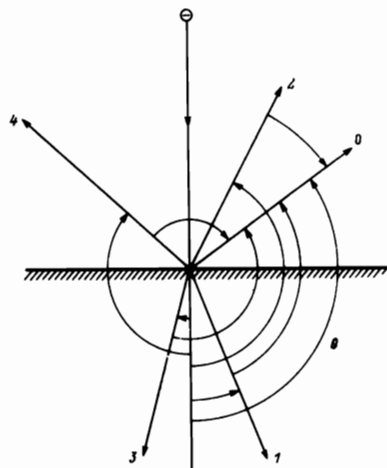


Рис.2. К вычислению интенсивности  $I_2^{np}$  двухкратного рассеяния электронного потока направо ( $\theta = 120^\circ$ )

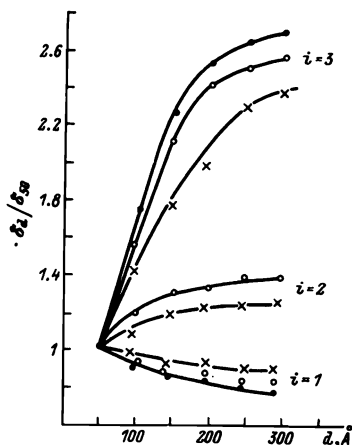


Рис. 3. Нормированные толщиновые зависимости относительного количества с определенной кратностью электронов.  
 • -  $N = 30000$ ; ○ -  $N = 10000$ , × -  $N = 1000$

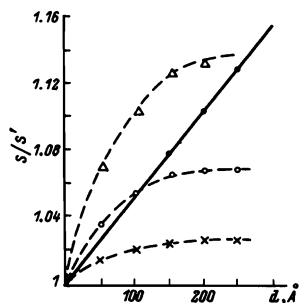


Рис. 4. Толщинные зависимости относительной функции асимметрии многократного рассеяния электронов в чистом спиновом состоянии: --- экспериментальные данные по работе [8]; -.-.- функция асимметрии рассеяния, рассчитанная при  $\Delta\theta = 10^\circ$ , -Δ-- функция асимметрии рассеяния, рассчитанная при  $\Delta\theta = 15^\circ$ , -x-- функция асимметрии рассеяния, рассчитанная при  $\Delta\theta = 5^\circ$

Для определения оптимального числа  $N$  статистических испытаний (т.е. числа рассеиваемых частиц) построены нормированные толщиновые зависимости относительного количества рассеянных с разной кратностью электронов для тонких пленок золота при  $E_p = 100$  кэВ и  $\theta = 120^\circ$  (рис. 3). Поскольку эти зависимости перестают существенно изменяться, начиная с  $N = 30000$ , это значение  $N$  выбрано в качестве оптимального и используется во всех дальнейших расчетах асимметрии многократного рассеяния.

циальные функции упругого рассеяния электронов  $A_i(\theta)$  в широкой области углов рассеяния  $\theta$  от  $30$  до  $160^\circ$  и энергий первичных электронов  $E_p$  от  $25$  до  $121$  кэВ.

Расчет относительных вкладов  $\delta_i(\theta)$  упруго рассеянных с кратностью  $i$  электронов на  $\theta$  в общее количество упруго рассеянных электронов производится методом статистических испытаний. Для численного нахождения величин  $\delta_i$  моделируется  $i$  случайных рассеяний электрона в пленке фиксированной толщины, при этом случайная длина свободного пробега  $l$  между последовательными рассеяниями разыгрывается согласно плотности распределения

$$p(l) = \frac{1}{L} e^{-l/L},$$

где  $L$  электрона согласно формуле (5) определяется полным сечением рассеяния и  $n_0$ , которая для золота имеет значение  $n_0 = 8,8821 \cdot 10^{-3}$  атом/(рад.Бора)<sup>3</sup>. Для вычислений полного сечения рассеяния и для разыгрывания угла отклонения при каждом рассеянии значения дифференциальных сечений рассеяния берутся из таблиц работы [5]. Случайная длина свободного пробега электрона моделируется по закону:

$$l = -L \ln \alpha,$$

где  $\alpha$  - равномерно распределенная величина в интервале от 0 до 1. Тогда величины  $\delta_i$  вычисляются по формуле

$$\delta_i = 1 - \int_0^{z_i} \frac{d_i}{L} e^{-l/L} dl = e^{-z_i/L} = e^{-z_i / \sin(\theta - \frac{\pi}{2}) L},$$

где  $z_i$  - углубление электрона в толщу пленки в точке  $i$ -го рассеяния,  $\theta$  - угол рассеяния электронов в детектор, отсчитываемый от направления первичного пучка.

По описанному алгоритму разработана программа, позволяющая рассчитывать функцию распределения относительно числа упруго рассеянных электронов по их кратности.

#### Результаты расчета и их обсуждение

Описанная выше методика расчета асимметрии многократного упругого рассеяния электронов применена для определения влияния многократной компоненты рассеяния на функцию Шермана в детекторе Мотта.

Вследствие больших математических трудностей рассмотрены только процессы рассеяния малой кратности ( $i = 2$  и  $i = 3$ ). В связи с этим для достижения заметного выхода обратно отраженных электронов во всех расчетах асимметрии рассеяния отброшены малые углы рассеяния. Физически такое приближение не должно исказить результаты расчетов, поскольку рассеяние электронов на малые углы не влияет на их спиновое состояние [5].

На рис. 4 представлены результаты расчета функции асимметрии многократного упругого рассеяния электронов в чистом спиновом состоянии ( $E_p = 100$  кэВ,  $\theta = 120^\circ$ ). Сравнение результатов расчета с соответствующими экспериментальными данными Пирса [8] показывает хорошее совпадение кривых при величине отброшенного интервала углов  $\Delta\theta = 10^\circ$  только в области малых толщин пленок (до 150–200 Å). Увеличение или уменьшение  $\Delta\theta$  отброшенного интервала углов приводит к усилению расхождения результата расчета с экспериментальной кривой. Для распространения расчета на область больших толщин пленки необходимо разработать новые алгоритмы расчета, учитывающие рассеяние с большой кратностью.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бронштейн И.М., Стожаров В.М./Изв.АН СССР. Сер.Физическая. - 1979. - Т. 43, № 3. - С. 500.
2. Мотт Н., Месси Н. Теория атомных столкновений. - М.: Мир, 1969.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - М.: Физматгиз, 1962.
4. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. - М.: Мир, 1983.
5. Holzwarth J., Meister H. Tables of asymmetry, cross-section and related functions for Mott scattering of electrons by screened gold and mercury nuclei. Inst. für Theor. Phys. der Univ. München. 1969.
6. Kessler J. Polarized Electrons.- Berlin: Springer Verlag, 1976.
7. Cosslett V., Thomas R.//Brit. J. Appl. Phys. 1964.- V. 15, N 8. - P. 883.
8. Garwin E., Meier F.//Nucl. Instrum. and Meth. 1974. - V. 120, N 3.- P. 483.
9. Ходж и др.// Приборы для научных исследований. - 1979. - № 1. - С. 7.
10. Хастед Д. Физика атомных столкновений. - М.: Мир, 1965.