

12. Цвеллин Р. А. Термодинамика твердого состояния. М.: Металлургия, 1963. 313.
 13. Williams F. L., Nason D. Binary alloy surface compositions from bulk alloy thermodynamic data.— Surface Sci., 1974, 45, 2, 377—408.

Институт металлофизики АН УССР,
г. Киев

Поступила в редакцию
22.VI 1981 г

УДК 537.533.35

К. Шеершмидт, С. А. Непийко, С. Карл

ПРОЯВЛЕНИЕ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В КАРТИНЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ

Введение

Теоретическим фундаментом интерференционной электронной микроскопии, в которой используется электростатический аналог бипризмы Френеля [1], служит выведенный методом стационарной фазы интеграл дифракции [2]. Этот подход позволяет заменить систему бипризмы F моделью двух виртуальных изображений источников электронов Q_1 и Q_2 , связанных с двумя непрозрачными плоскостями H_1 и H_2 противоположной ориентации, перекрываемых на ширину нити (рис. 1). Такая система дает интерференционные полосы, параллельные нити бипризмы, которые будут эквидистантными и одинаковой яркости в том случае, если можно пренебречь эффектами возмущения от непрозрачных полуплоскостей.

Введение тонкого объекта в один из виртуальных пучков приводит к дополнительному сдвигу фазы и искривлению интерференционных полос, форма которых является функцией геометрии объекта и распределения в нем потенциала. Эти свойства использовались для измерений профиля поверхности, среднего внутреннего потенциала V_c и его зависимости от температуры и размера частиц, для изучения влияния магнитных полей [3—8]. До сих пор не было работ по исследованию влияния локальных отклонений потенциала кристаллической решетки на форму интерференционных полос. Предложенная в настоящей работе модель, позволяющая рассчитать деформацию интерференционных полос, обусловленную дефектами решетки, дает возможность учесть вклад этих эффектов в V_c , его распределение в твердом теле и др.

Общая постановка задачи

Основное уравнение интерференции. Направим на интерферограмме ось ξ вдоль системы параллельных интерференционных полос вне объекта и ось η перпендикулярно ей. Расстояние между

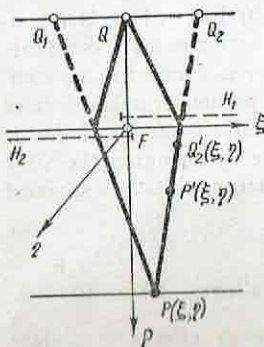


Рис. 1. Схема эксперимента.

Если учесть, что $V(r) \ll V_0$, и не делать различия между путями интегрирования Q_1P и Q_2P (рис. 1), то [9]

$$\Delta\Phi = \frac{\pi}{\lambda V_0} \int_{Q_2P} V(r) ds, \quad (2)$$

где λ — длина волны электронов с энергией eV_0 , $V(r)$ — потенциал возмущающего действия поля объекта. Дефекты решетки можно ввести

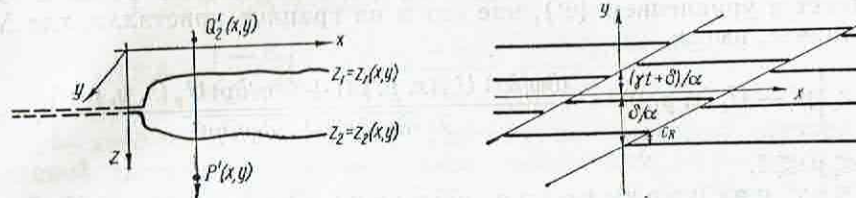


Рис. 2. Геометрия объекта.

Рис. 3. Интерферограмма решетки с дефектом упаковки в ограниченной плоскопараллельной кристаллической пластине.

в потенциал решетки так же, как и в динамической теории дифракционного контраста [10].

Модель дефекта. Предполагая, что деформация решетки из-за дефектов является преобладающей и что изменением локальной атомной структуры можно пренебречь, используем так называемое приближение деформированных ионов для потенциала

$$V(r) = V^0(r - U(r)). \quad (3)$$

Полагая, что смещения $U(r)$, вычисленные в рамках теории линейной упругости, являются малыми возмущениями, разложим выражение (3) в ряд

$$V(r) = V^0(r) - \text{grad } V^0(r) U(r). \quad (4)$$

Для упрощения вычислений потенциал невозмущенной решетки $V^0(r)$ можно заменить ступенчатой функцией. Пусть поверхность кристалла (рис. 2) разделена на верхний и нижний участки, описываемые соответственно $z_1 = z_1(x, y)$ и $z_2 = z_2(x, y)$, и объект пронизывается пучком, параллельным оси z . Тогда, используя ступенчатую функцию Хевисайда

$$\theta(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } z < 0, \\ 1 & \text{при } z \geq 0, \end{cases}$$

можно записать

$$V^0(r) = V_c \theta(z - z_1(x, y)) [1 - \theta(z - z_2(x, y))]. \quad (5)$$

Из уравнений (2), (4) и (5) можно получить выражение для разности фаз как функции координат объекта:

$$\Delta\Phi = c_0 [z_2(x, y) - z_1(x, y) + n_2 U(x, y, z_2(x, y)) - n_1 U(x, y, z_1(x, y))], \quad (6)$$

где $c_0 = \pi V_c / \lambda V_0$, $n_{1,2} = (-\partial z_{1,2} / \partial x - \partial z_{1,2} / \partial y) / \sqrt{1 + (\partial z_{1,2} / \partial x)^2 + (\partial z_{1,2} / \partial y)^2} -$

торой поверхности, описывающие его форму, записываются в виде

$$z_1(x, y) = 0, z_2(x, y) = \begin{cases} 0, & \varphi = 0, \\ \alpha\varphi(x, y), & 0 \leq \varphi \leq t/\alpha, \\ t, & \varphi > t/\alpha, \end{cases}$$

где α определяет наклон границы, а предельный случай $\alpha \rightarrow \infty$ соответствует участку поверхности, параллельному оси z , т. е. многозначной функции $z_2(x, y)$. В этом случае внутри изображения объекта $\Delta\Phi$ описывается уравнением (6'), вне его и на границе кристалла, где $\Delta\Phi$ многозначна, имеем

$$\Delta\Phi = c_0 \left[\mu t - U_z(x, y, 0) - \frac{(\partial\varphi/\partial x) U_x(x, y, \mu t) + (\partial\varphi/\partial y) U_y(x, y, \mu t)}{V(\partial\varphi/\partial x)^2 + (\partial\varphi/\partial y)^2} \right], \quad (7)$$

где $0 \leq \mu \leq 1$.

Учет распределения потенциала в окрестности поверхности объекта. Чтобы учесть поверхностные эффекты, в уравнение (5) добавляются члены

$$V_s^0(\mathbf{r}) = V_c [\Omega(z - z_1(x, y)) - \Omega(z - z_2(x, y))], \quad (8)$$

где Ω — функция, которая характеризует переходную область толщиной ϵ на поверхности и может быть представлена в виде функции Вуда — Саксона [5]

$$\Omega = [1 + \exp(-z/\epsilon)]^{-1}. \quad (9)$$

С учетом (8) в уравнении (6) получаем поправку первого порядка, однако в (6) $\Delta\Phi$ следует заменить суммой $\Delta\Phi + \Delta\Phi_s$, где

$$\Delta\Phi_s = \epsilon c_0 \left\{ 1 + [\Omega(z_1 + \epsilon) - \Omega(z_1 - \epsilon) - 1] \left[\frac{\partial U_z}{\partial z}(z_1) + \frac{\partial U_z}{\partial z}(z_2) \right] \right\}. \quad (10)$$

Однако, поскольку $\epsilon \ll t$ и $\partial U/\partial z$ в области линейной упругости мало, этой добавкой можно пренебречь и для численных расчетов использовать выражение (6).

Для расчета интерферограммы необходимо в уравнение (1) подставить выражение (6) и заменить систему координат (ξ, η) системой координат (x, y) , причем $\Delta\eta = \Delta y/M$, где M — увеличение. В пренебрежении эффектами анизотропии материалов были рассмотрены дефекты упаковки и дислокации.

Интерферограмма решетки с дефектами

Дефекты упаковки. Поле смещений дефекта упаковки характеризуется вектором смещения $\mathbf{R}$ между двумя соседними частями кристалла в плоскости дефекта упаковки $\alpha x + \beta y + \gamma z + \delta = 0$. Смещения могут быть записаны в виде

$$\mathbf{U}(x, y, z) = \mathbf{U}_0 + \mathbf{R}\theta(\alpha x + \beta y + \gamma z + \delta), \quad (11)$$

где $\mathbf{U}_0$ — произвольный вектор. Из уравнений (1), (6') и (11) следует

$$y_m - y_{mt} = c_R [\theta(\alpha x + \beta y + \gamma z + \delta) - \theta(\alpha x + \beta y + \delta)], \quad (12)$$

c_R составляет несколько процентов расстояния между интерференционными полосами.

Винтовая дислокация, параллельная поверхности. Поле смещений прямолинейной дислокации в изотропной среде с вектором Бюргерса (b_1, b_2, b_3) , параллельной оси x_3 произвольно выбранной системы координат, можно записать в виде [11]

$$U_i = \frac{b_i}{2\pi} \arctg \frac{x_2 b_1 - x_1 b_2}{x_1 b_1 + x_2 b_2} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} (b_2 \delta_{i1} - b_1 \delta_{i2}) \ln(x_1^2 + x_2^2) + \frac{1-\delta_{i3}}{4\pi(1-\nu)} \frac{x_i(b_1 x_2 - b_2 x_1)}{x_1^2 + x_2^2} + \frac{b_2 \delta_{i1} - b_1 \delta_{i2}}{8\pi(1-\nu)}, \quad (13)$$

где ν — коэффициент Пуассона. Рассмотрим несколько случаев. Для винтовой дислокации, параллельной поверхности, $b_1 = b_2 = 0$ и, т. к. $x_3 \perp z$, то $U_z = 0$. Тогда из уравнения (6') следует $y_m = y_{mt}$, т. е. интерференционные полосы не искривляются.

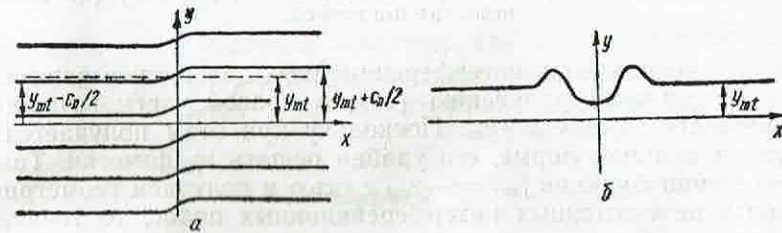


Рис. 4. Интерферограмма решетки с краевой дислокацией, параллельной оси y , с вектором Бюргерса, параллельным оси z (а) и оси x (б).

Краевая дислокация, параллельная оси y , с вектором Бюргерса, параллельным оси z . Преобразования можно характеризовать с помощью $x_1 = z - t_0$, $x_2 = x$, $x_3 = y$, $b_2 = b_3 = 0$, $b_1 = b$ и $U_z = U_1$. Из уравнений (1), (6') и (13) следует

$$y_m - y_{mt} = \frac{c_D}{2\pi} \left\{ \arctg \frac{x}{t - t_0} + \arctg \frac{x}{t_0} + \frac{x}{2(1-\nu)} \left[\frac{t - t_0}{x^2 + (t - t_0)^2} + \frac{t_0}{x^2 + t_0^2} \right] \right\}. \quad (14)$$

Параметр дислокации $c_D = c_0 \Delta y b / 2\pi$ выбирается аналогично c_R для дефекта упаковки и имеет такой же порядок величины. Выражение (14) описывает деформацию интерференционных полос в зависимости от глубины t_0 залегания дислокации от поверхности (рис. 4, а). На асимптотическое поведение этой зависимости при больших x параметры t_0 и t не влияют, следовательно, интерференционные полосы имеют шаг $y_{mt} \pm c_D/2$.

Краевая дислокация, параллельная оси y , с вектором Бюргерса, параллельным оси x . Поскольку в этом случае $b_1 = b_3 = 0$, $b_2 = b$, можно записать

ковых экстремума $\frac{c_D}{4\pi(1-\nu)} \frac{2t_0-t}{t}$ при $x|_{y=1/2} = \pm \sqrt{t_0(t-t_0)}$, причем минимум центрального и максимумы боковых экстремумов наблюдаются при $t_0 > t/2$, и наоборот при $t_0 < t/2$ (рис. 4, б).

Краевая дислокация, параллельная оси x , с вектором Бюргерса, параллельным оси z . В этом случае $x_1=y$, $x_2=z-t_0$, $x_3=x$, $b_1=b_3=0$, $b_2=b$ и $U_z=U_2$. Вызванные такой

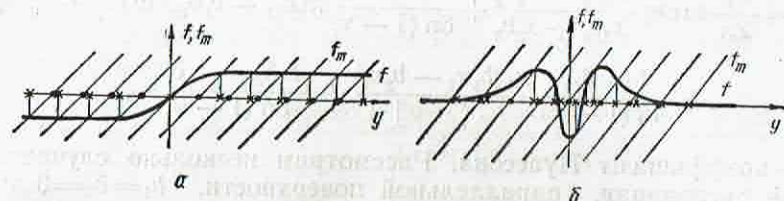


Рис. 5. Графическое определение положений (X) смещенных интерференционных полос, обусловленных краевой дислокацией, параллельной оси x , с вектором Бюргерса, параллельным оси z (а) и оси y (б). ● — несмещенные полосы.

дислокацией искривления интерференционных полос описываются уравнением, аналогичным уравнению (14), в правой части которого следует произвести замену $x \rightarrow y_m$. Поскольку при этом получается уравнение уже в неявной форме, его удобно решать графически. Так, если при пересечении функции $f_m = y - y_m$ с осью y получаем геометрическое место точек неискаженных интерференционных полос, то точки, в которых функции f_m пересекают кривую, описываемую правой частью уравнения (14) при замене $x \rightarrow y_m$, определяют положение смещенных интерференционных полос, т. е. их неэквидистантность (рис. 5, а).

Краевая дислокация, параллельная оси x , с вектором Бюргерса, параллельным оси y . Этот случай аналогичен предыдущему с $b_2=b_3=0$ и $b_1=b$. Поэтому снова приходим к выражению в неявном виде, которое удобно анализировать графически. Оно аналогично уравнению (15), в котором произведена замена $x \rightarrow y_m$. В малой области вокруг проекции дислокации на

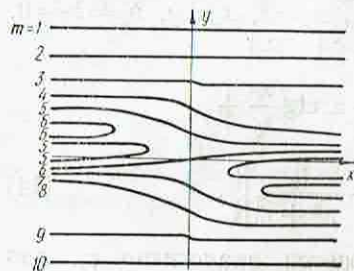


Рис. 6. Интерферограмма решетки с краевой дислокацией, расположенной в плоскости xy и наклоненной к поверхности плоскопараллельной пластины.

плоскость изображения, как видно из рис. 5, б, плотность интерференционных полос изменяется немонотонно. Если дислокация расположена вблизи поверхности, то из-за неоднозначности решения может наблюдаться расщепление интерференционных полос, хотя, строго говоря, уравнение (13) не выполняется точно при $t_0=0$ и $t_0=t$.

Дислокации, перпендикулярные поверхности. Такие дислокации характеризуются $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$ и $U_z=U_3$. Из уравнений (1), (6') и (13) получаем $y_m=y_{mt}$, что свидетельствует об отсутствии искривлений интерференционных полос.

$\pi/4$ к плоскости xz , описывается уравнением (15), в правой части которого, домноженной на $-1/\sqrt{2}$, следует произвести замену $x \rightarrow \sqrt{2}y_m$ и $t_0 \rightarrow x$. Тогда характер изменения расстояний между интерференционными полосами будет таким же, как на рис. 5, б. Из рис. 6, на котором приведены те же интерференционные полосы, но в плоскости xy , следует, что наряду со смещением интерференционных полос наблюдается их расщепление, причем все полосы или замкнуты, или начинаются и заканчиваются на границах кристалла.

Можно описать вращение области смещений по отношению к проекции дислокации наклоном плоскости скольжения на угол δ . Чтобы изучить это явление, выберем случай $b_1 = p \cos \delta$, $b_2 = p \sin \delta$, $b_3 = \sqrt{b^2 - p^2}$, $x_1 = x$, $x_2 = (y-z)/\sqrt{2}$, $x_3 = (y+z)/\sqrt{2}$ и $U_z = (U_1 - U_2)/\sqrt{2}$. При $p \rightarrow 0$ смещения, вызванные винтовой дислокацией,

$$y_m - y_{mt} = \frac{c_D}{2\pi} \left\{ \arctg \frac{y \cos \delta - \sqrt{2}x \sin \delta}{y \sin \delta + \sqrt{2}x \cos \delta} - \arctg \frac{(y-t) \cos \delta - \sqrt{2}x \sin \delta}{(y-t) \sin \delta + \sqrt{2}x \cos \delta} \right\}. \quad (16)$$

Из анализа этого уравнения следует, что между прямыми линиями $y = x/\sqrt{2} \cotg \delta$ и $y = t + x/\sqrt{2} \cotg \delta$ интерференционные полосы смещены на величину порядка $|c_D/4|$ и имеют ступеньку высотой $|c_D/2|$ на этих прямых.

Выводы

Прогиб интерференционных полос, создаваемых дефектом упаковки или дислокацией, составляет несколько процентов расстояния между интерференционными полосами, что необходимо учитывать при прецизионных измерениях, например, внутреннего потенциала [4]. Сами интерференционные полосы удобно фотометрировать и затем уже сравнивать положения их профилей. При этом интерференционная картина должна быть высокого качества. С этой целью в электронных интерферометрах с термокатодом, характеризующихся, как правило, высокой временной когерентностью, необходимо дополнительно диафрагмировать электронный пучок, чтобы повысить его пространственную когерентность [12]. Наиболее удобно для настоящих измерений использовать в качестве источника электронов автокатод [13].

В некоторых случаях наблюдались очень большие искривления интерференционных полос, соизмеримые с расстоянием между ними. В дальнейших экспериментах предполагается установить, какими именно дефектами (группа дислокаций, междискристаллические границы и др.) они обусловлены. Для этих специальных случаев в следующей работе с использованием предложенного теоретического подхода и выражения (5) будут проведены численные расчеты и их сопоставление с экспериментом.

Авторы выражают благодарность Х. Бетге и И. Хейденрайху за внимание и содействие при выполнении работы, а также П. Г. Борзяку и Ю. А. Кулюпину за полезные замечания, сделанные в ходе дискуссии.

SUMMARY. It is advisable to use interference electron microscopy for revealing and

1. Möllenstedt G., Düker H. Beobachtungen und Messungen an Biprisma-Interferenzen mit Elektronenwellen. — Z. Phys., 1956, 145, 3, 377—397.
2. Komrska J. Scalar diffraction theory in electron optics. — Adv. Electron. and Electron Phys., 1971, 30, 139—234.
3. Möllenstedt G., Keller M. Elektroneninterferometrische Messung des inneren Potentials. — Z. Phys., 1957, 148, 1, 34—37.
4. Mean inner potential of bismuth / H. Berger, Yu. A. Kulyupin, S. A. Nepijko et al. — Z. Phys. B, 1980, 37, 1, 23—26.
5. Средний внутренний потенциал малых металлических частиц / Х. Бергер, П. Г. Борзак, Ю. А. Кулюпин и др. Киев, 1978, 41. (Препринт ИФ-9-78).
6. Tomomura A. The electron interference method for magnetization measurement of thin films. — Jap. J. Appl. Phys., 1972, 11, 4, 493—502.
7. Lischke B. Direct observation of quantized magnetic flux in a superconducting hollow cylinder with an electron interferometer. — Phys. Rev. Lett., 1969, 22, 25, 1366—1368.
8. Interference electron microscopy in thin film investigations / G. Matteucci, G. F. Missiroli, G. Pozzi et al. — Thin Solid Films, 1979, 62, 1, 5—17.
9. Use of interference microscopy to measure electric field distribution / Yu. A. Kulyupin, S. A. Nepijko, N. N. Sedov, V. G. Shamonya. — Optik, 1978/79, 52, 2, 101—109.
10. Электронная микроскопия тонких кристаллов / П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон и др. М.: Мир, 1968. 574.
11. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599.
12. Хейденрайх Р. Основы просвечивающей электронной микроскопии. М.: Мир, 1966. 471.
13. Munch J. Experimental electron holography. — Optik, 1975, 43, 1, 79—99.

Институт физики АН УССР, г. Киев;
Институт физики твердого тела
и электронной микроскопии АН ГДР, г. Галле

Поступила в редакцию
15.IV 1981 г.

УДК 621.382.2.029.64

В. Е. Чайка, Н. В. Жембровская

О РАБОТЕ ДИОДОВ ГАННА С КОНТАКТОМ ТИПА БАРЬЕРА ШОТТКИ

1. Диоды Ганна с омическим контактом, работающие в миллиметровом диапазоне волн, имеют низкую эффективность вследствие малой энергии электронов, вылетающих из омического контакта и попадающих в область взаимодействия. Поэтому для достижения энергии, достаточной для междолинного перехода, электронам необходимо пролететь некоторое расстояние. Этот участок начального разогрева, так называемая мертвая зона, представляет собой положительное сопротивление, обуславливающее уменьшение общего отрицательного сопротивления диода и, как следствие, понижение эффективности прибора. Одним из путей устранения этого эффекта является создание катодных контактов с обратносмещенным барьером Шоттки. При этом электроны, вылетающие из катода, быстро набирают достаточную энергию в обедненной области.

2. Нами рассматривался вопрос о работе диодов Ганна на основе GaAs с контактами типа барьера Шоттки в длинноволновой части миллиметрового диапазона. Исследуемая структура диода имела вид $m-n^+-n$, где n^+ — узкая область длиной 0,2—0,3 мкм, необходимая для уменьшения длины области объемного заряда и обеспечения более высоких уровней тока, n — рабочая область кристалла. Расчеты производились на основе двухтемпературной модели [1]. Динамические уравнения для расчета диодов Ганна и алгоритм расчета приведены раньше [2]. В рамках этой модели предполагается, что распределение электронов по энергиям в каждой долине является максвелловским с различными температурами для каждой из долин, причем температура электронов в верхней долине равна температуре решетки. Для катода