

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	1971

01.71.11

PMM/A-77

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

SEPTIMO CURSO PANAMERICANO DE METALURGIA

Dentro del Programa Multinacional de Metalurgia
(Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico - OEA)

TEORIA DINAMICA DE LA DIFRACCION DE ELECTRONES ✓

Dr. M. Ipohorski

Departamento de Metalurgia
Buenos Aires - Argentina
1971

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

SEPTIMO CURSO PANAMERICANO DE METALURGIA

Dentro del Programa Multinacional de Metalurgia
(Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico - OEA)

TEORIA DINAMICA DE LA DIFRACCION DE ELECTRONES

Dr. M. Ipohorski

Departamento de Metalurgia
Buenos Aires - Argentina
1971

- I LIMITES DE VALIDEZ DE LA TEORIA CINEMATICA

- II DESARROLLO DE LA TEORIA DINAMICA, EL CRISTAL PERFECTO
 - II.1. Soluciones de la ecuación de Schroedinger en un potencial periódico.
 - II.2. Construcción de la superficie de dispersión.
 - II.3. Cálculo de las intensidades del haz transmitido y del haz difractado.
 - II.4. Absorción normal y absorción anómala.

- III EL CRISTAL IMPERFECTO
 - III.1. La matriz de difusión.
 - III.2. Fallas de apilamiento.
 - III.3. Otros defectos planos. El cristal deformado continuamente.

- IV TEORIA DE VARIOS HACES
 - IV.1. El cristal perfecto.
 - IV.2. El cristal imperfecto.

BIBLIOGRAFIA

El presente apunte se ha basado fundamentalmente en:

"Electron microscopy of thin crystals"
P. B. HIRSCH, A. HOWIE, R. B. NICHOLSON, D. W. PASHLEY,
M. J. WHELAN, Butterworths (London) 1965.

y en la publicación

"The dynamical theory of electron diffraction"
A. J. F. METHERELL, Cambridge, 1968

que formará parte de un libro a aparecer próximamente.

Un desarrollo detallado de la teoría dinámica puede verse también en

"Fundamentals of transmission electron microscopy"
R. D. HEIDENREICH, Wiley, New York, 1964.

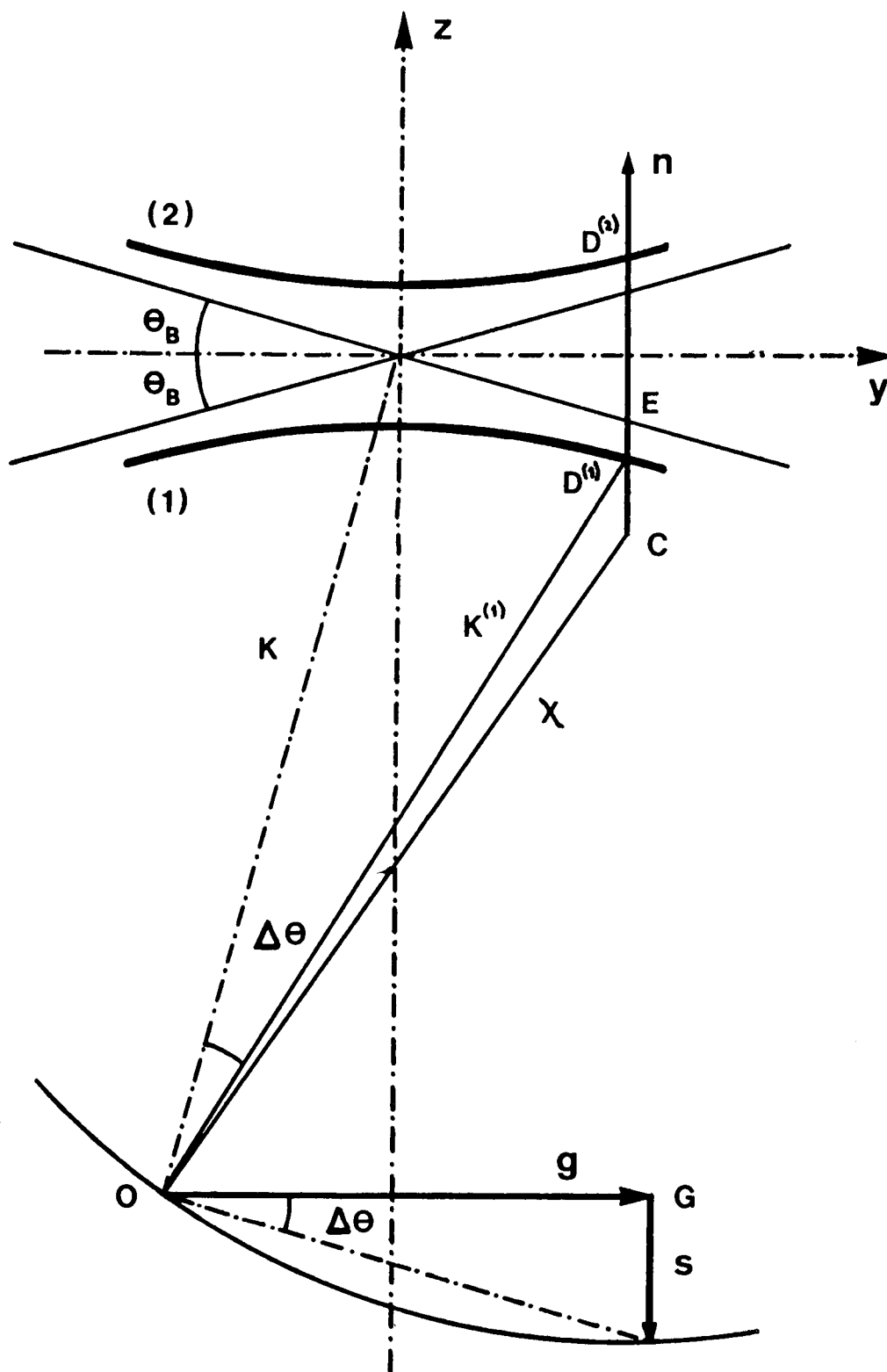
El lector interesado en los detalles del cálculo de intensidades de distintos defectos cristalinos, puede consultar las referencias de los trabajos originales citados en el libro de Hirsch y colaboradores.



Imagen de una lámina delgada de cobre, de espesor variable, ligeramente deformada, orientada cerca de la posición de Bragg (111).

A: Franjas de igual inclinación

B: Franjas de igual espesor. Nótese que por efectos de absorción, solamente son visibles unas 8 o 9 franjas - Foto: A.A.Pochettino.



II.4. Construcción de la superficie de dispersión.

I . LIMITES DE VALIDEZ DE LA TEORIA CINEMATICA

La teoría cinemática de la difracción de electrones permite describir las características principales del contraste presentado por una gran variedad de defectos cristalinos. Pero, rigurosamente hablando, es válida solamente si la amplitud Φ_g de la onda difractada es pequeña frente a la amplitud Φ_0 de la onda transmitida. De esta manera, para un cristal imperfecto de espesor t , en el cual los desplazamientos atómicos a una profundidad z están dados por $\vec{R}(z)$, la amplitud difractada Φ_g estaba dada por

$$\Phi_g = \int_0^t e^{-2ni \vec{g} \cdot \vec{R}(z)} e^{-2ni sz} dz \quad (I.1)$$

donde s es el parámetro de desviación de la posición de Bragg. Esta expresión fué obtenida sumando las amplitudes de las ondas difundidas por cada uno de los átomos de una columna, teniendo en cuenta las diferencias de fase correspondientes. Sin embargo, si la amplitud difractada Φ_g llega a ser suficientemente grande, hay que considerar la posibilidad de que la onda difractada pueda a su vez ser difundida por los átomos del cristal. Las predicciones de la teoría cinemática dejan de ser válidas, entonces, para pequeños valores de s , es decir cuando nos acercamos a la posición de Bragg. Esto puede verse fácilmente en la expresión de la intensidad difractada para un cristal perfecto sobre el cual incide un haz de intensidad unitaria,

$$|\Phi_g|^2 = \frac{\eta^2}{\xi_g^2} \frac{\text{sen}^2 nts}{(\eta s)^2}$$

Para $s = 0$, esta expresión se reduce a

$$|\Phi_g|^2 = \left(\frac{\eta t}{\xi_g} \right)^2$$

lo que significaría que para un cristal de espesor

$$t > \frac{\xi_g}{\eta}$$

la intensidad difractada es mayor que la intensidad del haz incidente.

Como los cristales normalmente utilizados en microscopía electrónica tienen espesores del orden de $10 \xi_g$, es inmediato que las predicciones de la teoría cinemática no son válidas para orientaciones próximas a la de Bragg, y que es necesario desarrollar una teoría que tenga en cuenta las posibilidades de difracción múltiple y la interacción dinámica de la onda incidente con la difractada. Esta es la llamada teoría dinámica de la difracción.

Como el fenómeno de difracción electrónica depende de la naturaleza ondulatoria de los electrones, es evidente que la teoría a desarrollar de-

be basarse en los principios de la mecánica ondulatoria.

II. DESARROLLO DE LA TEORIA DINAMICA. EL CRISTAL PERFECTO.

II.1. Soluciones de la ecuación de Schroedinger en un potencial periódico

Consideremos el problema de la propagación de un electrón de alta energía en un potencial periódico. La solución del mismo consiste en encontrar las funciones de onda $\psi(\vec{r})$ del electrón, que son soluciones de la ecuación de Schroedinger

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{8\pi^2 m e}{h^2} \{ E + V(\vec{r}) \} \psi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{II.1})$$

La energía total del electrón es eE , siendo entonces E el potencial a través del cual fué acelerado (tensión de aceleración del microscopio). Si el electrón se mueve en el vacío, es $V(\vec{r}) = 0$, y si se desplaza en un cristal, $V(\vec{r})$ es el potencial cristalino. Por el momento, la única restricción que impondremos a las soluciones de la ecuación de Schroedinger es que la energía del electrón sea constante, es decir que la energía total del electrón dentro del cristal sea igual a eE . Por supuesto después habrá que considerar otras restricciones, como que el cristal tiene superficies libres, pero por ahora no tomaremos en cuenta esta posibilidad, y trataremos el problema de la propagación de un electrón de energía total eE en un cristal infinito.

Un cristal consiste en la repetición de un motivo tridimensional de átomos. Por lo tanto el potencial cristalino tiene que ser periódico, y desarrollable en una serie de Fourier del tipo

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} \exp 2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r} \quad (\text{II.2})$$

donde la suma se extiende sobre todos los vectores \vec{g} de la red recíproca y las cantidades $V_{\vec{g}}$ son los coeficientes de Fourier del potencial cristalino. Si ponemos

$$V_{\vec{g}} = \frac{U_{\vec{g}}}{2\pi e} \quad (\text{II.3})$$

esta nueva notación simplificará el desarrollo algebraico más adelante. El potencial $V(\vec{r})$ deberá cumplir los siguientes requisitos :

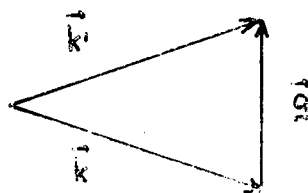
- $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{a})$
donde \vec{a} es un vector traslación de la celda primitiva. Es evidente que $V(\vec{r})$ deberá tener la misma periodicidad de la red.
- $V(\vec{r}) = V^*(\vec{r})$
el asterisco significa "complejo conjugado", p. ej. $(a + ib)^* = (a - ib)$. Lógicamente esta condición implica que el potencial debe ser real.
- Si además el cristal tiene un centro de simetría en el origen, también se cumple que

$$V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$$

Si el potencial satisface estas condiciones, entonces

$$U_g = U_{-g} = U_g^* \quad (\text{II.4})$$

Volvamos ahora a nuestro problema, es decir, encontrar las soluciones $\psi(\vec{r})$ de la ecuación (II.1). Ya sabemos que siempre que una partícula se mueve en un medio cristalino, existe la posibilidad de que ocurra el fenómeno de difracción. Por lo tanto la solución más general deberá consistir en una onda directa más una serie de ondas difractadas. Sabemos también que la relación entre el vector de onda \vec{k} de la onda incidente, y \vec{k}' , el correspondiente a una onda difractada, está dada por la ecuación de Laue

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$$


Entonces, la función de onda de un electrón dentro del cristal podrá expresarse como una onda de Bloch, es decir una suma del tipo

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} \exp 2\pi i (\vec{k} + \vec{g}) \cdot \vec{r} \quad (\text{II.5})$$

Para $g = 0$ obtenemos

$$C_0 \exp 2\pi i \vec{k} \cdot \vec{r}$$

que es la onda directa de vector de onda \vec{k} y amplitud C_0 . Si es $g \neq 0$ se obtiene una de las ondas difractadas de amplitud C_g y vector de onda $\vec{k} + \vec{g}$. La ecuación (II.5) es por lo tanto la solución más general de la ecuación de Schroedinger. Reemplazando II.5 y II.2 en la ecuación II.1 se obtiene

$$\sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} \nabla^2 (\exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r}) + \frac{8n^2 m e}{h^2} \left\{ E + \frac{h^2}{2me} \sum_{\mathbf{g}} U_{\mathbf{g}} \exp 2ni\vec{g}\cdot\vec{r} \right\} \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} = 0$$

Recordando que

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \exp 2ni\vec{k}\cdot\vec{r} = \frac{\partial}{\partial x} \exp 2ni(k_x x + k_y y + k_z z) = 2ni k_x \exp 2ni\vec{k}\cdot\vec{r}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \exp 2ni\vec{k}\cdot\vec{r} = -4n^2 k_x^2 \exp 2ni\vec{k}\cdot\vec{r}$$

y entonces

$$\nabla^2 \exp 2ni\vec{k}\cdot\vec{r} = -4n^2 |\vec{k}|^2 \exp 2ni\vec{k}\cdot\vec{r}$$

$$-\sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} 4n^2 |\vec{k}+\vec{g}|^2 \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} + \frac{8n^2 m e}{h^2} E \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} + 4n^2 \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{h}} U_{\mathbf{h}} \exp 2ni\vec{h}\cdot\vec{r} \times C_{\mathbf{g}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} = 0$$

①

②

Llamando $\vec{g} + \vec{h} = \vec{p}$, o sea $\vec{g} = \vec{p} - \vec{h}$

$$\textcircled{1} + \textcircled{2} + \sum_{\mathbf{p}=\mathbf{h}} \sum_{\mathbf{h}} U_{\mathbf{h}} C_{\mathbf{p}-\mathbf{h}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{r} = 0$$

$$\textcircled{1} + \textcircled{2} + \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{h}} U_{\mathbf{h}} C_{\mathbf{p}-\mathbf{h}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{r} = 0$$

Volviendo a llamar $\vec{g} = \vec{p}$

$$\textcircled{1} + \textcircled{2} + \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{h}} U_{\mathbf{h}} C_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} = 0$$

Finalmente

$$-\sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} |\vec{k}+\vec{g}|^2 \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} + \frac{2me}{h^2} E \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} + \sum_{\mathbf{g}} U_0 C_{\mathbf{g}} \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} + \sum_{\mathbf{g}} \left(\sum_{\mathbf{h} \neq 0} U_{\mathbf{h}} C_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} \right) \exp 2ni(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r} = 0$$

Para que esta última suma de exponenciales sea igual a cero, deben ser iguales a cero todos los coeficientes. Esta condición nos conduce a un sistema de ecuaciones que deben satisfacer las amplitudes $C_{\mathbf{g}}$,

$$-C_{\mathbf{g}} |\vec{k}+\vec{g}|^2 + \frac{2me}{h^2} E C_{\mathbf{g}} + U_0 C_{\mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{h} \neq 0} U_{\mathbf{h}} C_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} = 0$$

Llamando

$$K^2 = \frac{2me E}{h^2} + U_0$$

$$\left\{ K^2 - (\vec{k}+\vec{g})^2 \right\} C_{\mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{h} \neq 0} U_{\mathbf{h}} C_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} = 0 \quad (\text{II.6})$$

donde la última suma se extiende sobre todos los valores de g excepto $g=0$. K es el vector de onda del electrón en el cristal corregido por el efecto de refracción por el potencial medio V_0 del cristal. Esto puede verse fácilmente si se tiene en cuenta que la función de onda del electrón en el vacío es una onda plana de la forma

$$\psi(\vec{r}) = \exp 2\pi i \vec{\chi} \cdot \vec{r} \quad (\text{II.7})$$

donde $\vec{\chi}$ es el vector de onda en el vacío. Si reemplazamos esta última expresión en la ecuación (II.1) se obtiene

$$\chi = \sqrt{\frac{2meE}{h^2}}$$

y por lo tanto

$$K^2 = \chi^2 + U_0$$

Volvamos entonces a las ecuaciones II.6. En general no es posible resolverlas por medios analíticos. Pero sí se supone que solamente el haz transmitido y uno solo difractado son excitados, entonces el problema se simplifica. En la aproximación de dos haces, solamente las amplitudes C_0 y C_g correspondientes al haz transmitido y al difractado, respectivamente, tienen valores distintos de cero. Las ecuaciones II.6 se reducen entonces a

$$\text{para } C_0 \quad \left\{ K^2 - k^2 \right\} C_0 + U_{-g} C_g = 0 \quad (\text{II.8})$$

$$\text{para } C_g \quad \left\{ K^2 - (\vec{k} + \vec{g})^2 \right\} C_g + U_g C_0 = 0$$

Estas ecuaciones tienen por supuesto la solución trivial $C_0 = C_g = 0$. La condición para que existan soluciones no triviales es que el determinante formado por los coeficientes de C_0 y C_g sea igual a cero

$$\begin{vmatrix} K^2 - k^2 & U_{-g} \\ U_g & K^2 - (\vec{k} + \vec{g})^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$(K^2 - k^2)(K^2 - (\vec{k} + \vec{g})^2) - U_g U_{-g} = 0$$

Ecuación de dispersión

(II.9)

Esta última ecuación es fundamental en la teoría dinámica. Se llama ecuación de dispersión pues relaciona, por un lado, todos los vectores de onda \vec{k} que pueden ser excitados en el cristal, con los valores de la energía total eE del electrón. Por otro lado nos da todos los valores posibles de \vec{k} , cuyo conocimiento es esencial para poder determinar el grado de interferencia entre las distintas ondas cristalinas. La ecuación II.9 puede simplificarse más aún, teniendo en cuenta que los valores típicos de los coeficientes de Fourier V_g del potencial cristalino son del orden de los 10 volts, mientras que los potenciales aceleradores E del haz son del orden de 10^5 volts. Si escribimos la ecuación II.9 en la forma

$$\left(\frac{k^2}{K^2} - 1 \right) \left(\frac{(\vec{k} + \vec{g})^2}{K^2} - 1 \right) = \frac{U_g U_{-g}}{K^4}$$

$$V_g \approx 10 \text{ volt} \quad E = 10^5 \text{ volt} \quad U_g \approx \frac{2me}{h^2} 10 \text{ volt}$$

$$K^2 = \frac{2me}{h^2} 10^5 \text{ volt} + \frac{2me}{h^2} 10 \text{ volt} \quad K^4 \approx \left(\frac{2me}{h^2} \right)^2 10^{10} \text{ volt}^2$$

entonces

$$\frac{U_g U_{-g}}{K^4} = \frac{10^2 \text{ volt}^2}{10^{10} \text{ volt}^2} \left(\frac{2me}{h^2} \right)^2 \frac{1}{\left(\frac{2me}{h^2} \right)^2} = 10^8$$

Siendo esta última cantidad muy pequeña, entonces,

$$\frac{k^2}{K^2} \quad \text{y} \quad \frac{(\vec{k} + \vec{g})^2}{K^2}$$

deben ser muy próximos a la unidad. Entonces la ecuación II.9 puede escribirse

$$\left(\frac{k}{K} - 1 \right) \left(\frac{k}{K} + 1 \right) \left(\frac{|\vec{k} + \vec{g}|}{K} - 1 \right) \left(\frac{|\vec{k} + \vec{g}|}{K} + 1 \right) = \frac{U_g U_{-g}}{K^4}$$

$$\left(\frac{k-K}{K} \right) (1+1) \left(\frac{|\vec{k} + \vec{g}| - K}{K} \right) (1+1) = \frac{U_g U_{-g}}{K^4}$$

$$(k-K)(|\vec{k} + \vec{g}| - K) = \frac{U_g^2}{4K^4}$$

(II.10)

Esta es la ecuación de dispersión para electrones de alta energía en un cristal.

II.2 Construcción de la superficie de dispersión

La ecuación de dispersión tiene una interpretación geométrica muy útil. Trataremos primero el caso sencillo de un electrón en el vacío. En es-

te caso la función de onda, como ya lo hemos dicho, está dada por la ecuación II.7, y los posibles valores del módulo de χ son

$$\chi = \sqrt{\frac{2meE}{h^2}}$$

Esta es la ecuación de dispersión para un electrón en el vacío. Como E es fijo, entonces los valores de χ también son fijos. Pero no hay restricción en cuanto a la dirección y sentido de χ . Entonces si se dibujan todos los vectores χ posibles con sus orígenes en un punto común, los extremos de los mismos describirán una esfera, Figura II.1 (a).

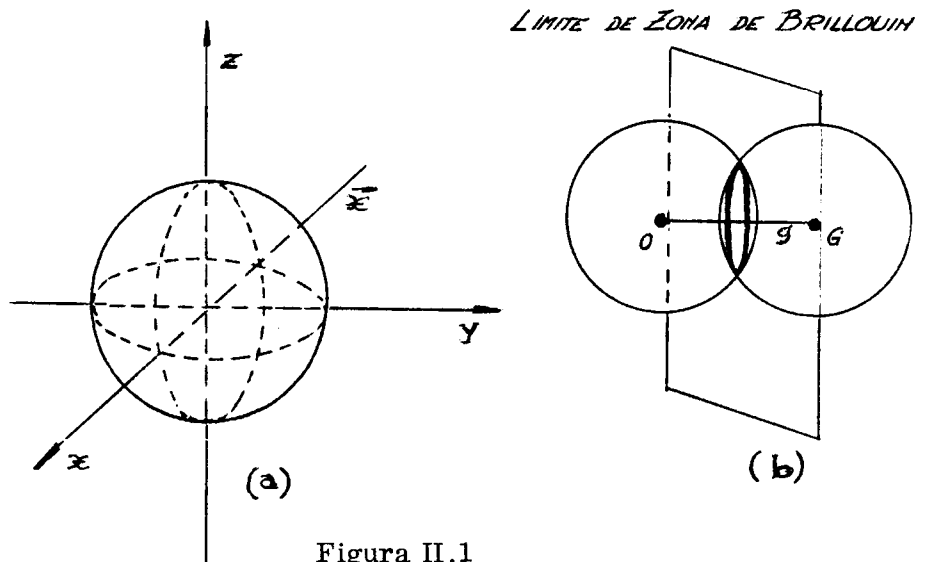


Figura II.1

Esta esfera es una superficie de energía total constante, representada en el espacio $\vec{\chi}$ (o \vec{k}) llamada superficie de dispersión.

Consideremos ahora la ecuación II.10 para el caso particular de $U_g = 0$. Físicamente esta situación corresponde al caso de una reflexión de Bragg que se hace cada vez más débil, o sea el caso cinemático. La misma ecuación II.10 nos da

$$|\vec{k}| = K \quad \text{y} \quad |\vec{k} + \vec{g}| = K$$

Una construcción similar en ciertos aspectos a la esfera de Ewald se puede hacer entonces en el espacio recíproco (o el espacio k , pues ambos tienen iguales dimensiones de longitud recíproca). Si todos los vectores posibles \vec{k} y $\vec{k} + \vec{g}$ se dibujan en este espacio con sus extremos en el origen 0 y en el punto G respectivamente, Figura II.1 (b), se obtienen dos esferas de radio K que se cortan según una circunferencia. Estas son las superficies de energía constante, es decir la superficie de dispersión, en el caso cinemático. También en la Figura 1 (b) se puede ver que los puntos de la inter-

sección de las dos esferas están sobre un plano que es bisector del vector \vec{g} . Este plano se denomina límite de zona de Brillouin. Si un par de vectores \vec{k} y $\vec{k} + \vec{g}$ tienen sus extremos sobre esta intersección entonces se satisface exactamente la ley de Bragg, pues

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$$

Estos dos ejemplos considerados son muy simples, y facilitan la interpretación de la ecuación II.10 que haremos a continuación.

Desarrollando la ecuación II.9

$$K^4 + k^2 |\vec{k} + \vec{g}|^2 - |\vec{k} + \vec{g}|^2 K^2 - k^2 K^2 - U_g^2 = 0$$

$$K^4 - \{k^2 + |\vec{k} + \vec{g}|^2\} K^2 + k^2 |\vec{k} + \vec{g}|^2 - U_g^2 = 0$$

se obtiene una ecuación cuadrática en K^2 , cuyas soluciones son

$$\begin{aligned} K^2 &= \frac{1}{2} \{k^2 + |\vec{k} + \vec{g}|^2\} \pm \left\{ \frac{1}{4} (k^2 + |\vec{k} + \vec{g}|^2 - k^2 |\vec{k} + \vec{g}|^2 + U_g^2) \right\}^{1/2} \\ &= \frac{1}{2} (k^2 + |\vec{k} + \vec{g}|^2) \pm \left\{ \frac{1}{4} k^4 + \frac{1}{4} |\vec{k} + \vec{g}|^4 - \frac{1}{2} k^2 |\vec{k} + \vec{g}|^2 + U_g^2 \right\}^{1/2} \\ &= \frac{1}{2} (k^2 + |\vec{k} + \vec{g}|^2) \pm \left\{ \frac{1}{4} (k^2 - |\vec{k} + \vec{g}|^2)^2 + U_g^2 \right\}^{1/2} \end{aligned}$$

Pero como

$$K^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2} + U_0 \quad U_0 \text{ y } E \text{ son fijos}$$

entonces K^2 debe tener un solo valor y no dos. Esta condición se puede satisfacer si \vec{k} puede tomar a su vez dos valores. O sea que en vez de una única superficie de energía constante, la superficie de dispersión correspondiente a la ecuación II.10 consta en realidad de dos superficies. Pero hay que destacar que estas dos superficies corresponden a un mismo valor de energía total, y entonces para evitar confusiones, a cada una de ellas la denominaremos en lo sucesivo ramas de la superficie de dispersión. Cada rama da los vectores de onda de las distintas ondas que pueden existir en el cristal. Por lo tanto existen dos soluciones independientes para las funciones de onda $\psi(\vec{r})$, que son

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{r}) &= C_0^{(1)} \exp 2ni \vec{k}_1 \cdot \vec{r} + C_g^{(1)} \exp 2ni (\vec{k}_1 + \vec{g}) \cdot \vec{r} \\ \phi_2(\vec{r}) &= C_0^{(2)} \exp 2ni \vec{k}_2 \cdot \vec{r} + C_g^{(2)} \exp 2ni (\vec{k}_2 + \vec{g}) \cdot \vec{r} \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

donde los sufijos 1 y 2 caracterizan las ondas correspondientes a las dos

ramas. Estas soluciones son degeneradas, y corresponden a dos estados diferentes de energía cinética del electrón, pero de igual energía total. La razón física de la existencia de estas dos soluciones será considerada más adelante. La solución más general de la ecuación de Schroedinger será entonces una combinación lineal de

$$\phi_1(\vec{r}) \quad \text{y} \quad \phi_2(\vec{r})$$

Este punto será tratado con mayor detalle cuando consideremos las superficies libres del cristal.

Entonces, de acuerdo a la ecuación II.9 la superficie de dispersión consta de dos ramas. La ecuación II.10 muestra que la forma de estas dos ramas en las vecindades del límite de zona de Brillouin es hiperbólica. Para demostrarlo tomaremos un sistema de coordenadas en el espacio recíproco, de la manera siguiente. Hemos visto que cuando $U_g = 0$ la superficie de dispersión consta de dos esferas que se cortan

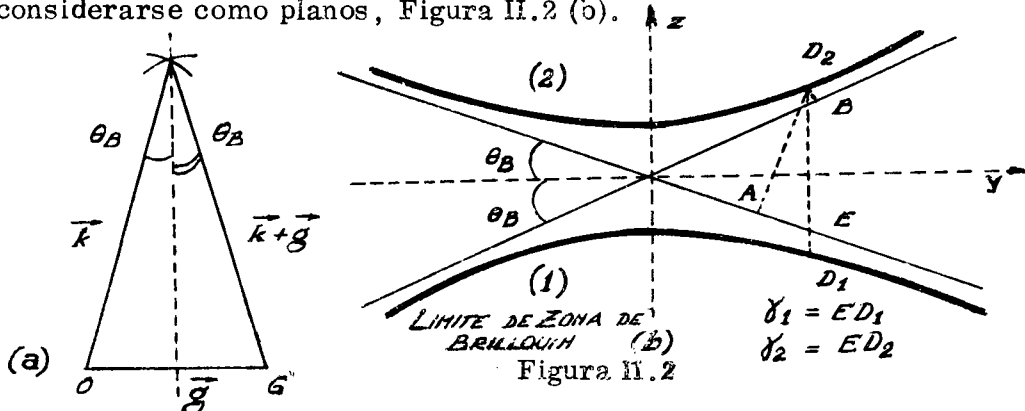
$$U_g = 0 \quad \longrightarrow \quad K^2 = \frac{1}{2}(k^2 + |\vec{k} + \vec{g}|^2) \pm \frac{1}{2}(k^2 - |\vec{k} + \vec{g}|^2) = \begin{cases} k^2 & (+) \\ |\vec{k} + \vec{g}|^2 & (-) \end{cases}$$

Pero si $U_g \neq 0$ la ecuación II.12 muestra que una de las ramas de la superficie de dispersión debe quedar por debajo de la intersección de las dos esferas, y la otra por arriba. La rama inferior la denominaremos rama (1), correspondiente a los posibles vectores \vec{k}_1 , y la rama que está arriba de la intersección la llamaremos en lo sucesivo rama (2), correspondiente a los vectores \vec{k}_2 .

Ahora bien, habíamos visto ya al considerar la teoría cinemática que los valores de K eran mucho mayores que los de los vectores recíprocos \vec{g} , y la relación era, para electrones de 100 kV,

$$\bar{K} \approx 50 \bar{g}$$

por lo tanto, cerca del límite de zona de Brillouin, las dos esferas pueden considerarse como planos, Figura II.2 (b).



Eligiendo el sistema de coordenadas zy como el indicado en la figura, y considerando dos puntos D_1 y D_2 de coordenadas (z_1, y) (z_2, y) de tal manera que los valores de y sean los mismos, y además

$$z_1 = -z_2$$

entonces

$$\begin{aligned} k-K &= z_2 \cos \theta_B + y \operatorname{sen}(-\theta_B) \\ &= z_2 \cos \theta_B - y \operatorname{sen} \theta_B \end{aligned}$$

y también

$$|\vec{k} + \vec{g}| - K = z_1 \cos \theta_B + y \operatorname{sen} \theta_B$$

Entonces la ecuación de dispersión II.10 puede escribirse de la forma

$$\begin{aligned} (z_j \cos \theta_B - y \operatorname{sen} \theta_B)(z_j \cos \theta_B + y \operatorname{sen} \theta_B) &= \frac{U_g^2}{4K^2} \\ (z_j - y \operatorname{tg} \theta_B)(z_j + y \operatorname{tg} \theta_B) &= \frac{U_g^2}{4K^2 \cos^2 \theta_B} \end{aligned}$$

donde $j = 1, 2$ y θ_B es el ángulo de Bragg. El segundo miembro de esta última ecuación es constante. Llamando

$$\xi_g = \frac{K \cos \theta_B}{U_g}$$

queda finalmente

$$(z^2 - y^2 \operatorname{tg}^2 \theta_B) = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2 \quad (\text{II.14})$$

que es la ecuación de una hipérbola. O sea que en las cercanías del límite de zona de Brillouin, la superficie de dispersión es hiperbólica, y la separación entre las dos ramas en el límite de zona

$$y = 0 \quad z = \pm \frac{1}{2} \frac{1}{\xi_g}$$

es por lo tanto $1/\xi_g$. Para valores relativamente grandes de y , las dos ramas de la hipérbola son asintóticas a la esfera de radio K , lo que significa que se tiende al caso cinemático. Por supuesto la forma de las dos ramas se aleja de la hipérbola geométrica para valores grandes de y , puesto que las superficies de las dos esferas dejan de cumplir la aproximación de dos planos. También, la forma de la superficie de dispersión debe volver a ser hiperbólica en los límites de zona de Brillouin adyacentes al primer límite considerado en nuestro cálculo. Por lo tanto un corte de la superficie de dispersión deberá tener la forma de la Figura II.3.

Se puede obtener una visión tridimensional de toda la superficie, imaginando que la Figura II.3 rota alrededor del eje -GOG-

Hasta ahora hemos considerado solamente los posibles vectores de onda que pueden ser excitados en un cristal, y ya que la superficie de dis-

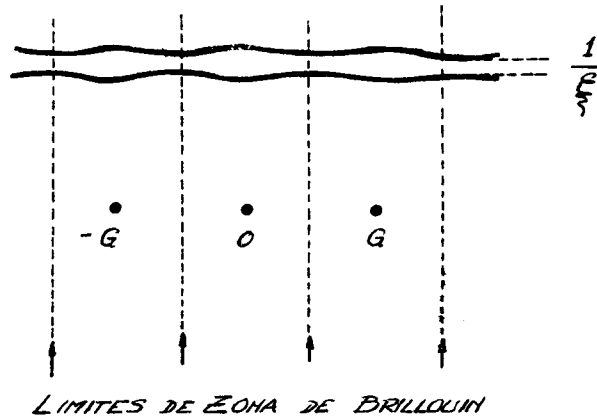


Figura II.3

persión consiste en un número infinito de puntos, deben existir infinitos vectores \vec{k} . Más adelante demostraremos que las condiciones de contorno son las que determinan las ondas que realmente se excitan en el cristal, y veremos como una construcción sencilla puede dar estas ondas para una orientación dada del cristal. Esta construcción es la siguiente. A través del punto C, Figura II.4, del vector de onda $\vec{\chi}$ del vacío, se traza un vector \vec{n} paralelo a la normal a la superficie superior del cristal. Los puntos D_1 y D_2 sobre las dos ramas de la superficie de dispersión intersectadas por \vec{n} , corresponden a las ondas excitadas. En el caso simétrico de Laue, o sea planos difractantes perpendiculares a la superficie del cristal, \vec{n} es paralelo al límite de zona de Brillouin. En el caso general \vec{n} estará inclinado respecto del límite de zona.

II.3 Cálculo de las intensidades del haz transmitido y del haz difractado

El propósito fundamental de la teoría dinámica es calcular las intensidades del haz directo y los haces difractados. En la aproximación de dos haces la solución más general de la ecuación de Schrödinger es una combinación lineal de las funciones de onda degeneradas $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$, ec.

II.13. La función de onda total $\psi(\vec{r})$ estará dada entonces por

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \theta_1 \phi_1(\vec{r}) + \theta_2 \phi_2(\vec{r}) \\ &= \sum_{j=1,2} \theta_j \left\{ C_0^{(j)} \exp 2\pi i \vec{k}_j \cdot \vec{r} + C_g^{(j)} \exp 2\pi i (\vec{k}_j + \vec{g}) \cdot \vec{r} \right\} \quad (\text{II.15}) \end{aligned}$$

donde θ_1 y θ_2 son constantes arbitrarias. Para calcular las intensidades del haz transmitido y del haz difractado es necesario conocer los valores de las amplitudes

$$\theta_j C_0^{(j)} \quad \text{y} \quad \theta_j C_g^{(j)}$$

Cuando se planteen las condiciones de contorno en las superficies del

crystal, se verá que las constantes θ_1 y θ_2 tienen un significado físico muy preciso. Comenzaremos calculando los valores de $C_0^{(j)}$ y $C_g^{(j)}$.

Los valores absolutos de $C_0^{(j)}$ y $C_g^{(j)}$ no pueden calcularse a partir de las ecuaciones II.8, ya que éstas constituyen un sistema de ecuaciones lineales homogéneas. Pero los cocientes $C_g^{(j)}/C_0^{(j)}$ pueden obtenerse a partir de II.8

$$\begin{aligned} (K^2 - k^2) C_0 + U_g C_g &= 0 & \frac{C_g}{C_0} &= \frac{k_j^2 - K^2}{U_g} \\ U_g C_0 + (K^2 - (\vec{k} + \vec{g})^2) C_g &= 0 & \frac{C_g}{C_0} &= \frac{U_g}{(\vec{k} + \vec{g})^2 - K^2} \end{aligned}$$

Además como el determinante debía ser nulo

$$(k^2 - K^2)((\vec{k} + \vec{g})^2 - K^2) = U_g U_{-g}$$

y como

$$\frac{k^2}{K^2} \approx 1$$

entonces

$$\frac{C_g^{(j)}}{C_0^{(j)}} = \frac{(k_j + K)(k_j - K)}{U_g} \approx \frac{2K(k_j - K)}{U_g} \quad (\text{II.16})$$

La diferencia $k_j - K$ puede expresarse en función de la geometría de la superficie de dispersión, y de la construcción de la esfera de Ewald. En regiones cercanas al límite de zona de Brillouin, si z es la coordenada paralela a este límite

$$k_j - K \approx (k_{zj} - K_z) \cos \theta_B = \delta_j \cos \theta_B$$

donde δ_j es la diferencia entre la componente z de los vectores de onda k_j y K , y θ_B es el ángulo de Bragg. La ecuación II.16 se puede expresar entonces

$$\frac{C_g^{(j)}}{C_0^{(j)}} = \frac{2K \delta_j \cos \theta_B}{U_g}$$

La única variable en esta ecuación es δ_j , que es función de la coordenada y . Esto significa que las amplitudes $C_0^{(j)}$ y $C_g^{(j)}$ son funciones de los vectores de onda \vec{k}_j . Cuando $y = 0$, δ_1 y δ_2 son iguales, pero opuestos en signo, y el cristal está orientado en la posición exacta de Bragg, o sea que la ecuación de Laue $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$ se satisface exactamente. La coordenada y es por lo tanto una medida de la desviación de la posición exacta de Bragg.

Las diferencias δ_j pueden expresarse en términos del parámetro de desviación y , según la geometría de la Figura II.2 (b)

$$\delta_j = y \operatorname{tg} \theta_B + z_j$$

y despejando z_j de la ecuación II.14

$$z_j^2 - y^2 \operatorname{tg}^2 \theta_B = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2$$

$$(z_j - y \operatorname{tg} \theta_B)(z_j + y \operatorname{tg} \theta_B) = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2$$

$$z_j - y \operatorname{tg} \theta_B = \frac{1}{\delta_j} \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2$$

Pero como

$$z_j = \delta_j - y \operatorname{tg} \theta_B$$

llegamos finalmente a la ecuación cuadrática en δ_j

$$\delta_j^2 - 2y \operatorname{tg} \theta_B \delta_j - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2 = 0$$

cuyas soluciones son

$$\begin{aligned} \delta_j &= y \operatorname{tg} \theta_B \pm \sqrt{y^2 \operatorname{tg}^2 \theta_B + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2} \\ &= y \operatorname{tg} \theta_B \pm \frac{1}{2} \sqrt{(2y \operatorname{tg} \theta_B)^2 + \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2} \end{aligned}$$

el signo (-) corresponde a la rama (1), el signo (+) a la rama (2), y $1/\xi_g$ es la separación de las ramas para $y = 0$.

La coordenada y no es la única medida de la desviación de la posición de Bragg. Esta desviación también puede medirse por el ángulo $\Delta\theta$, Figura II.4, y por el vector \vec{s} , trazado paralelamente al límite de zona de Brillouin desde G hasta la esfera de Ewald. Las relaciones entre y , $\Delta\theta$ y \vec{s} pueden obtenerse a partir de la geometría de la Figura II.4.

$$\operatorname{tg} \Delta\theta = \frac{s}{g} \quad y \quad (\cos \theta_B)^{-1} = K \operatorname{tg} \Delta\theta$$

$$\operatorname{tg} \Delta\theta = \frac{y}{K} (\cos \theta_B)^{-1} \quad \Delta\theta = \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{y}{K \cos \theta_B} \right)$$

como

$$g = 2K \sin \theta_B \quad \frac{y}{K} \frac{1}{\cos \theta_B} = \frac{s}{2K \sin \theta_B} \quad s = 2y \operatorname{tg} \theta_B$$

Teniendo en cuenta este último resultado

$$\delta_j = kz_j - Kz = \frac{s}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2} = \frac{1}{2} \left(s \pm \sqrt{s^2 + \left(\frac{1}{\xi_g} \right)^2} \right)$$

Llamando

$$x = s \frac{\xi_g}{2} \quad \delta_j = \frac{1}{2 \xi_g} \left(x \pm \sqrt{1 + x^2} \right) \quad (\text{II.17})$$

Este parámetro x , que se introduce porque simplifica cálculos posteriores, no tiene dimensiones pues ξ_g y $1/s$ tienen dimensiones de longitud. Además como

$$\xi_g = \frac{K \cos \theta_B}{U_g} \quad U_g = U_{-g}$$

el cociente de las amplitudes de onda puede escribirse

$$\frac{C_g^{(\omega)}}{C_o^{(\omega)}} = x \pm (-1)^j \sqrt{1+x^2} \quad (\text{II.18})$$

donde $j = 1, 2$ según la rama de que se trate. Como x es el parámetro de desviación de la posición de Bragg, este último resultado muestra que la razón de las amplitudes de onda depende solamente de la orientación del cristal respecto del haz incidente.

Los valores absolutos de C_{oj} y C_{gj} son arbitrarios puesto que aparecen en un sistema de ecuaciones lineales homogéneas. Para fijar de alguna manera sus valores absolutos hay que adoptar un criterio de normalización. Veamos cual es el procedimiento de normalización más adecuado.

En la aproximación de dos haces existen dos soluciones independientes $\Phi_1(\vec{r})$ y $\Phi_2(\vec{r})$, ec. II.13, de la ecuación de Schroedinger. Ambas soluciones son degeneradas y la función de onda total está dada por la combinación lineal de las mismas, ec. II.15. Es posible dar un significado físico a los multiplicadores θ_1 y θ_2 de la ec. II.15 en función de la construcción de la superficie de dispersión, si las intensidades de los campos de onda correspondientes a las ramas superior e inferior son normalizadas a la unidad. Si ésto se hace, entonces θ_1 y θ_2 tomarán valores que representan directamente el grado de excitación de las distintas ramas en el cristal. Como veremos más adelante, θ_1 y θ_2 estarán determinados por las condiciones en los límites del cristal.

Entonces el procedimiento que adoptaremos para normalizar será

$$\int \phi_j \phi_j^* d\vec{r} = 1$$

$$\phi_j \phi_j^* = |C_o^{(\omega)}|^2 + |C_g^{(\omega)}|^2 + C_o^{(\omega)} C_g^{(\omega)} \exp(-2ni\vec{g}\cdot\vec{r}) + C_o^{(\omega)*} C_g^{(\omega)} \exp(2ni\vec{g}\cdot\vec{r})$$

Como el promedio de la función exponencial en todo el cristal es cero

$$\int \exp(2ni\vec{g}\cdot\vec{r}) d\vec{r} = 0$$

queda

$$|C_o^{(\omega)}|^2 + |C_g^{(\omega)}|^2 = 1 \quad |C_o^{(\omega)}|^2 + |C_g^{(\omega)}|^2 = 1$$

(II.19)

Entonces, a partir de II.18 y II.19

$$\frac{C_g^{(1)}}{C_o^{(1)}} = x - \sqrt{1+x^2} \quad |C_o^{(1)}|^2 + |C_g^{(1)}|^2 (x^2 + 1 + x^2 - 2x\sqrt{1+x^2}) = 1$$

$$|C_o^{(1)}|^2 (1 + x^2 - x\sqrt{1+x^2}) = \frac{1}{2}$$

Haciendo la sustitución

$$x = \cotg \beta = \frac{\cos \beta}{\sin \beta}$$

$$|C_o^{(1)}|^2 \left(1 + \frac{\cos^2 \beta}{\sin^2 \beta} - \frac{\cos \beta}{\sin \beta} \sqrt{1 + \frac{\cos^2 \beta}{\sin^2 \beta}} \right) = \frac{1}{2}$$

$$|C_o^{(1)}|^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \beta} - \frac{\cos \beta}{\sin^2 \beta} \right) = \frac{1}{2} \quad |C_o^{(1)}|^2 = \frac{1}{2} \frac{\sin^2 \beta}{1 - \cos \beta}$$

$$|C_o^{(1)}|^2 = \frac{1}{2} \frac{1 - \cos^2 \beta}{1 - \cos \beta} = \frac{1}{2} (1 + \cos \beta) = \cos^2 \frac{\beta}{2} \quad C_o^{(1)} = \cos \frac{\beta}{2}$$

De la misma manera se llega a las expresiones para los cuatro coeficientes

$$C_o^{(1)} = C_g^{(2)} = \cos \frac{\beta}{2}$$

$$C_o^{(2)} = -C_g^{(1)} = \sin \frac{\beta}{2} \quad (\text{II.20})$$

Entonces ahora podemos calcular como varían las intensidades de los dos campos de onda con la posición \vec{r} dentro del cristal. Las expresiones de las funciones de onda son, teniendo en cuenta II.20

$$\phi_1(\vec{r}) = \cos \frac{\beta}{2} \exp 2ni \vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \sin \frac{\beta}{2} \exp 2ni (\vec{k}_1 + \vec{g}) \cdot \vec{r}$$

$$\phi_1^*(\vec{r}) = \cos \frac{\beta}{2} \exp -2ni \vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \sin \frac{\beta}{2} \exp -2ni (\vec{k}_1 + \vec{g}) \cdot \vec{r}$$

y la intensidad

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{r}) \phi_1^*(\vec{r}) &= \cos^2 \frac{\beta}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2} - \sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \exp -2ni \vec{g} \cdot \vec{r} - \sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \exp 2ni \vec{g} \cdot \vec{r} \\ &= 1 - \sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} (\exp 2ni \vec{g} \cdot \vec{r} + \exp -2ni \vec{g} \cdot \vec{r}) \\ &= 1 - 2 \sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \cos 2n \vec{g} \cdot \vec{r} \end{aligned}$$

La expresión general de la intensidad es

$$\phi^{(i)}(\vec{r}) \phi^{(i)*}(\vec{r}) = 1 + (-1)^j \sin \beta \cos 2n \vec{g} \cdot \vec{r} \quad (\text{II.21})$$

Si el origen de los vectores \vec{r} se toma en el centro de simetría del

crystal, por ejemplo en una posición atómica, y si consideramos una dirección \vec{r} que sea paralela a \vec{g} , entonces se obtiene inmediatamente la variación de la intensidad de los campos de onda en una dirección perpendicular a los planos difractantes. Los resultados se muestran en la Figura II.5. Con la normalización de las ec. II.18 se asegura que la intensidad promedio de estos campos de onda es igual a uno. Las ondas del tipo (1) corresponden a un flujo de electrones concentrado entre los planos atómicos, donde la energía potencial es mayor que en los planos mismos. Como la energía total del electrón es constante, entonces la energía cinética de un electrón asociado con las ondas de tipo (1) es menor que la correspondiente a un electrón asociado a la onda (2), donde el flujo está concentrado en los planos atómicos.

A medida que aumenta la desviación de la posición de Bragg, el flujo electrónico se distribuye de manera más uniforme, ver Figura II.5, de manera que las energías cinéticas correspondientes a ambos estados se hacen más parecidas, y llegan a ser iguales cuando se alcanza la situación cinemática, o sea para valores grandes de x .

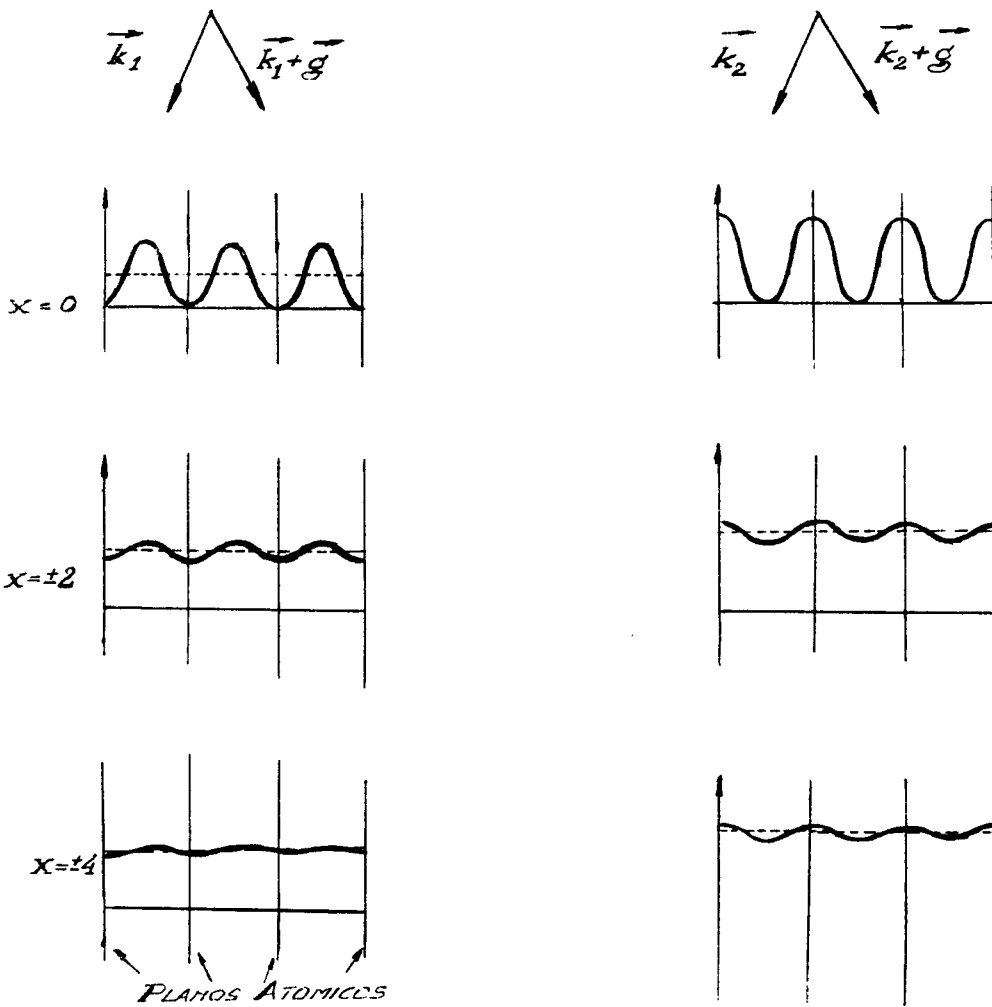


Figura II.5

Calcularemos ahora los valores de θ_1 y θ_2 , teniendo en cuenta las condiciones de contorno. Estas condiciones, planteadas sobre las superficies libres del cristal, muestran también que las ondas reflejadas por las superficies pueden despreciarse. Este hecho facilita el cálculo de las intensidades, pues si las amplitudes reflejadas fueran apreciables, habría posibilidad de interferencia entre las ondas que viajan hacia arriba y abajo, y el cálculo sería muy complicado. Para demostrar que las amplitudes reflejadas pueden despreciarse, y poder calcular además θ_1 y θ_2 , consideraremos un cristal semi-infinito, para no complicar el cálculo introduciendo una segunda superficie.

Supongamos que el plano $z = 0$ es la superficie libre del cristal y que estamos en el caso simétrico de Laue. Fuera del cristal, la función de onda del electrón es

$$\psi(\vec{r}) = \exp 2\pi i \vec{\chi} \cdot \vec{r} + R_1 \exp 2\pi i \vec{\chi}'_1 \cdot \vec{r} + R_2 \exp 2\pi i \vec{\chi}'_2 \cdot \vec{r} \quad (\text{II.22})$$

El primer término describe la onda incidente, y los otros dos las ondas reflejadas. La razón por la cual se consideran dos ondas reflejadas,

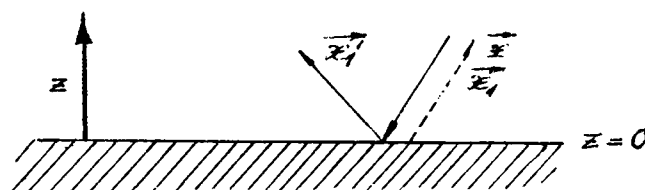


Figura II.6

es que puede existir la posibilidad de difracción en la superficie, Figura II.6. Si $\vec{\chi}$ tiene componentes $(\chi_x \ \chi_y \ \chi_z)$, entonces debido a esta posibilidad de difracción, podrá existir un vector de onda

$$\vec{\chi}'_1 = \vec{\chi} + \vec{g} + \vec{s}$$

de componentes $(\chi'_x \ \chi'_y \ \chi'_z)$. Las componentes de $\vec{\chi}'_1$ y $\vec{\chi}'_2$ serán entonces, respectivamente

$$(\chi_x \ \chi_y \ -\chi_z) \quad \text{y} \quad (\chi'_x \ \chi'_y \ -\chi'_z)$$

Dentro del cristal la función de onda es

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{j=1,2} \theta_j \left\{ C_0^{(j)} \exp 2\pi i \vec{k}^{(j)} \cdot \vec{r} + C_g^{(j)} \exp 2\pi i (\vec{k}_j + \vec{g}) \cdot \vec{r} \right\} \quad (\text{II.23})$$

y aplicando las condiciones de contorno de la mecánica cuántica, es decir que ψ y $d\psi/dz$ deben ser continuas sobre la superficie del cristal

$$\text{fuera} \quad \psi(z=0) = \exp 2ni(\chi_x X + \chi_y Y) + R_1 \exp(\chi_{1x} X + \chi_{1y} Y) + R_2 \exp 2ni(\chi'_{1x} X + \chi'_{1y} Y)$$

$$\text{adentro} \quad \psi(z=0) = \theta_1 C_0^{(1)} \exp 2ni(k_{1x} X + k_{1y} Y) + \theta_1 C_g^{(1)} \exp 2ni\{(\bar{k}_1 + \bar{g})_x X + (\bar{k}_1 + \bar{g})_y Y\} + \\ + \theta_2 C_0^{(2)} \exp 2ni(k_{2x} X + k_{2y} Y) + \theta_2 C_g^{(2)} \exp 2ni\{(\bar{k}_2 + \bar{g})_x X + (\bar{k}_2 + \bar{g})_y Y\}$$

$$1 + R_1 = \theta_1 C_0^{(1)} + \theta_2 C_0^{(2)} \quad (\text{II.24/a})$$

$$R_2 = \theta_1 C_g^{(1)} + \theta_2 C_g^{(2)} \quad (\text{II.24/b})$$

La continuidad de las derivadas

$$\text{afuera} \quad \frac{d\psi}{dz} = 2ni\chi_z \exp 2ni\bar{\chi} \cdot \bar{r} + R_1 2ni\chi_{1z} \exp 2ni\bar{\chi}_1 \cdot \bar{r} + R_2 2ni\chi'_{1z} \exp 2ni\bar{\chi}'_1 \cdot \bar{r}$$

$$\text{adentro} \quad \frac{d\psi}{dz} = \theta_1 C_0^{(1)} 2ni k_{1z} \exp 2ni\bar{k}_1 \cdot \bar{r} + \theta_1 C_g^{(1)} 2ni(\bar{k}_1 + \bar{g})_z \exp 2ni(\bar{k}_1 + \bar{g}) \cdot \bar{r} + \\ + \theta_2 C_0^{(2)} 2ni k_{2z} \exp 2ni\bar{k}_2 \cdot \bar{r} + \theta_2 C_g^{(2)} 2ni(\bar{k}_2 + \bar{g})_z \exp 2ni(\bar{k}_2 + \bar{g}) \cdot \bar{r}$$

que para $z = 0$ se expresan, teniendo en cuenta la relación entre las componentes de $\bar{\chi}$, $\bar{\chi}'_1$, $\bar{\chi}_1$ y $\bar{\chi}'_2$

$$(1 - R_1)\chi_z = k_{1z}\theta_1 C_0^{(1)} + k_{2z}\theta_2 C_0^{(2)} \quad (\text{II.24/c})$$

$$-R_2\chi'_z = k_{1z}\theta_1 C_g^{(1)} + k_{2z}\theta_2 C_g^{(2)} \quad (\text{II.24/d})$$

Como las componentes de los vectores de onda corresponden a electrones de alta energía

$$\frac{k_{z1}}{\chi_z} \quad \frac{k_{z2}}{\chi_z} \quad \frac{k_{1z}}{\chi'_z} \quad \frac{k_{2z}}{\chi'_z} \approx 1$$

entonces se puede ver fácilmente, a partir de las ecuaciones II.24, que

$$R_1 \approx 0 \quad R_2 \approx 0$$

lo que significa que las ondas reflejadas por las superficies del cristal pueden despreciarse.

A partir de las ecuaciones II.24 también se puede calcular los valores de θ_1 y θ_2

$$\theta_1 C_0^{(u)} + \theta_2 C_0^{(u)} = 1 = \phi_0(0) \quad \text{Onda incidente, ramas 1 y 2, para } z=0 \quad (\text{II.25/a})$$

$$\theta_1 C_0^{(v)} + \theta_2 C_0^{(v)} = 0 = \phi_0(0) \quad \text{Onda difractada, ramas 1 y 2, para } z=0 \quad (\text{II.25/b})$$

Según las ecuaciones II.20

$$\begin{aligned} \theta_1 \cos \frac{\beta}{2} + \theta_2 \sin \frac{\beta}{2} &= 1 \\ -\theta_1 \sin \frac{\beta}{2} + \theta_2 \cos \frac{\beta}{2} &= 0 \end{aligned}$$

de donde

$$\theta_1 = \cos \frac{\beta}{2} \quad \theta_2 = \sin \frac{\beta}{2} \quad (\text{II.26})$$

Estos coeficientes representan el grado de excitación de las dos ondas de Bloch dentro del cristal. Por ejemplo, para

$$x=0 \quad \text{Posición de Bragg} \quad \beta = \frac{\pi}{2} \quad \frac{\beta}{2} = \frac{\pi}{4}$$

y entonces

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \frac{\sqrt{2}}{2} & \theta_2 &= \frac{\sqrt{2}}{2} \\ |\theta_1|^2 &= \frac{1}{2} & |\theta_2|^2 &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Las condiciones de contorno también nos permitirán ahora hacer la construcción para determinar los puntos correspondientes a las ondas excitadas en la superficie de dispersión, para una orientación dada del cristal. Para esta construcción solamente es necesario demostrar que las ondas están en fase en el límite cristal-vacío. Si se igualan las amplitudes de la onda transmitida y difractada dentro del cristal, con la amplitud del haz incidente

$$\sum_{j=1,2} \theta_j C_0^{(u)} \exp 2\pi i \bar{k}_j \cdot \bar{r} = \exp 2\pi i \bar{\chi} \cdot \bar{r} \quad (\text{II.27/a})$$

$$\sum_{j=1,2} \theta_j C_0^{(v)} \exp 2\pi i (\bar{k}_j + \bar{q}) \cdot \bar{r} = 0 \quad (\text{II.27/b})$$

Si elegimos el origen de los vectores \vec{r} sobre la superficie del cristal $z = 0$, sobre un centro de simetría, entonces las expresiones

$$\vec{k}_j \cdot \vec{r} \quad \text{y} \quad \vec{\chi} \cdot \vec{r}$$

en las ecuaciones II.27 son proporcionales a las componentes tangenciales de \vec{k}_j y $\vec{\chi}$. Además comparando las ecuaciones II.25/b con II.27/b se puede ver que las fases

$$\vec{k}_1 \cdot \vec{r} \quad \text{y} \quad \vec{k}_2 \cdot \vec{r}$$

son iguales, ya que los coeficientes $\theta_1 C_g^{(1)}$ y $\theta_2 C_g^{(2)}$ son números reales, ec. II.20 y II.26. Comparando de la misma manera las ec. II.25/a y II.27/a se ve que las fases

$$\vec{k}_j \cdot \vec{r} \quad \text{y} \quad \vec{\chi} \cdot \vec{r}$$

son también iguales. Esto significa que las componentes tangenciales de

$$\vec{k}_1 \quad \vec{k}_2 \quad \vec{\chi}$$

son iguales, y la única manera de asegurar esta igualdad, es mediante la construcción mencionada en II.2.

Ahora es posible calcular las intensidades de los haces directo y difractado planteando las condiciones de contorno en la superficie inferior del cristal. Esta es la superficie $z = t$, donde t es por lo tanto el espesor de la lámina cristalina. La función de onda del electrón del lado del vacío es

$$\psi(\vec{r}) = \phi_0(t) \exp 2\pi i \vec{K} \cdot \vec{r} + \phi_g(t) \exp 2\pi i (\vec{K} + \vec{g}) \cdot \vec{r} \quad (\text{II.28})$$

El significado de esta función es inmediato. La función de onda es equivalente a una onda difractada y una directa de amplitudes $\phi_g(t)$ y $\phi_0(t)$ respectivamente.

La función $\psi(\vec{r})$ dentro del cristal, para $z = t$, estaba dada por la ec. II.23

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) = & \theta_1 C_0^{(1)} \exp 2\pi i \vec{k}_1 \cdot \vec{r} + \theta_2 C_0^{(2)} \exp 2\pi i \vec{k}_2 \cdot \vec{r} + \\ & + \theta_1 C_g^{(1)} \exp 2\pi i (\vec{k}_1 + \vec{g}) \cdot \vec{r} + \theta_2 C_g^{(2)} \exp 2\pi i (\vec{k}_2 + \vec{g}) \cdot \vec{r} \end{aligned}$$

Los dos primeros términos corresponden a la onda directa, y los dos últimos a la onda difractada. Igualando términos correspondientes en II.23 y II.28, tomando el origen de \vec{r} sobre la superficie de salida del haz

$$\phi_0(\vec{r}) \exp 2ni K_z z = \theta_1 C_0^{(i)} \exp 2ni k_{1z} z + \theta_2 C_0^{(i)} \exp 2ni k_{2z} z$$

para $z = t$

$$\phi_0(t) = \theta_1 C_0^{(i)} \exp 2ni \gamma_1 t + \theta_2 C_0^{(i)} \exp 2ni \gamma_2 t$$

$$\gamma_j = k_{jz} - K_z$$

Análogamente

$$\phi_g(t) \exp 2ni K_z t = \theta_1 C_g^{(i)} \exp 2ni k_{1z} t + \theta_2 C_g^{(i)} \exp 2ni k_{2z} t \quad (\text{II.29})$$

$$\phi_g(t) = \theta_1 C_g^{(i)} \exp 2ni \gamma_1 t + \theta_2 C_g^{(i)} \exp 2ni \gamma_2 t$$

Con los valores ya obtenidos de $\theta_j C_0^{(i)}$ y $\theta_j C_g^{(i)}$, queda

$$\phi_0(t) = \cos^2 \frac{\beta}{2} \exp 2ni \gamma_1 t + \text{sen}^2 \frac{\beta}{2} \exp 2ni \gamma_2 t$$

$$\phi_g(t) = -\cos \frac{\beta}{2} \text{sen} \frac{\beta}{2} \exp 2ni \gamma_1 t + \text{sen} \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \exp 2ni \gamma_2 t$$

Las intensidades se pueden calcular entonces inmediatamente. Comencemos por la intensidad transmitida

$$\phi_0(t) = \left[\cos^2 \frac{\beta}{2} \cos 2ni \gamma_1 t + \text{sen}^2 \frac{\beta}{2} \cos 2ni \gamma_2 t \right] + i \left[\cos^2 \frac{\beta}{2} \text{sen} 2ni \gamma_1 t + \text{sen}^2 \frac{\beta}{2} \text{sen} 2ni \gamma_2 t \right]$$

$$|\phi_0(t)|^2 = \cos^4 \frac{\beta}{2} + \text{sen}^4 \frac{\beta}{2} + 2 \cos^2 \frac{\beta}{2} \text{sen}^2 \frac{\beta}{2} \cos 2ni (\gamma_1 - \gamma_2) t$$

Recordando que

$$\gamma_j = \frac{1}{2 \xi_g} \left(x - (-1)^j \sqrt{1+x^2} \right)$$

$$\gamma_1 - \gamma_2 = \frac{1}{\xi_g} \quad \frac{1 - \cos \beta}{2} = \text{sen}^2 \frac{\beta}{2} \quad x = \cotg \beta$$

entonces

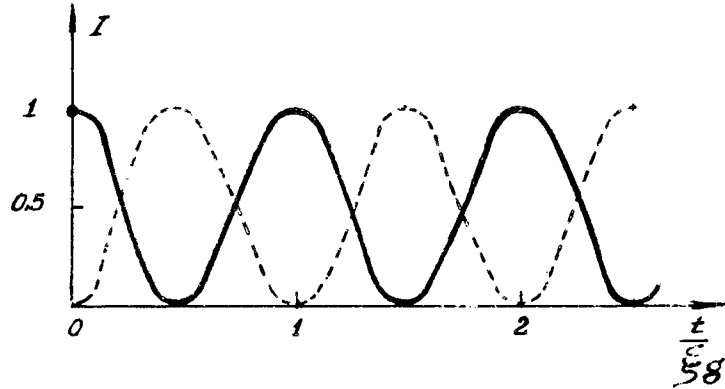
$$|\phi_0(t)|^2 = \left(\frac{1 + \cos \beta}{2} \right)^2 + \left(\frac{1 - \cos \beta}{2} \right)^2 + 2 \left(\frac{1 + \cos \beta}{2} \right) \left(\frac{1 - \cos \beta}{2} \right) \cos 2ni \frac{\sqrt{1+x^2}}{\xi_g} t$$

$$|\phi_0(t)|^2 = 1 - \text{sen}^2 \beta \text{sen}^2 \pi \frac{\sqrt{1+x^2}}{\xi_g} t \quad (\text{II.30/a})$$

Análogamente se calcula la intensidad difractada

$$|\phi_g(t)|^2 = \text{sen}^2 \beta \text{sen}^2 \pi \frac{\sqrt{1+x^2}}{\xi_g} t \quad (\text{II.30/b})$$

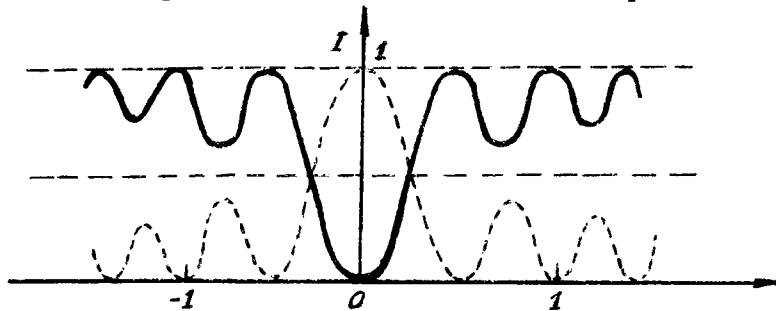
Las intensidades $|\phi_0(t)|^2$ y $|\phi_g(t)|^2$ oscilan si x o t varían. Estas variaciones se representan en la Figura II.7 en función del espesor t del cristal para $x = 0$. La periodicidad de las oscilaciones de intensidad en la posición exacta de Bragg ($x = 0$) es precisamente ξ_g , la recíproca de la separación de las dos ramas de la superficie de dispersión sobre el límite de zona de Brillouin.



Trazo lleno : intensidad transmitida
Trazo punteado : intensidad difractada

Figura II.7

Este fenómeno de oscilación de la intensidad con el espesor de la lámina se llama extinción, y el parámetro ξ_g se denomina distancia de extinción. La razón de este fenómeno es que las ondas excitadas en la rama superior de la superficie de dispersión tienen longitudes de onda diferentes de las correspondientes a la rama inferior. A medida que se propagan en el cristal, las ondas provenientes de distintas ramas interfieren entre sí y originan oscilaciones de intensidad según la profundidad del cristal. Las ecuaciones II.30 también predicen oscilaciones de la intensidad con el parámetro de desviación de la posición de Bragg. En la Figura II.8 se grafican estas variaciones para una lámina cristalina de espesor constante.



Trazo lleno : intensidad transmitida
Trazo punteado : intensidad difractada

Figura II.8

Ahora bien, como ya se ha dicho al tratar la teoría cinemática, una micrografía electrónica es sencillamente un registro de la intensidad transmitida (campo claro) o la intensidad difractada (campo oscuro) debajo de la superficie inferior de la lámina cristalina. Por lo tanto se pueden comprobar las predicciones de la teoría, observando imágenes de monocristales en distintas condiciones. Por ejemplo, un cristal en forma de cuña (x constante, t variable) orientado cerca de la posición de Bragg, presenta franjas alternadamente claras y oscuras, tal como lo predice la teoría. Pero en una observación experimental estas franjas desaparecen progresivamente al aumentar el espesor t , cosa que no predice la teoría considerada hasta aquí, ec. II.30. La razón de ello es que no hemos considerado el fenómeno de absorción.

II.4. Absorción normal y absorción anómala

La teoría considerada hasta aquí no ha considerado la posibilidad de una atenuación del haz directo o del haz difractado. Antes de comenzar el desarrollo matemático, es importante comprender la razón física de esta atenuación. La imagen electrónica se produce introduciendo una apertura en el plano focal de la lente objetivo de manera de seleccionar uno solo de los haces de Bragg. Este mecanismo de producción de contraste, llamado contraste por difracción, está tenido en cuenta por la teoría desarrollada hasta ahora, y no es responsable de ningún fenómeno de absorción. Sin embargo no todos los electrones son difundidos elásticamente (ley de Bragg). Alguno puede sufrir una difusión inelástica. Por ejemplo un diagrama de difracción de un cristal relativamente espeso, presenta una intensidad difundida en regiones situadas entre los haces de Bragg. Esta intensidad difusa corresponde a la difusión inelástica que no ha sido considerada por la teoría, y que es la responsable de la absorción. Supondremos, como aproximación, que todos los electrones difundidos inelásticamente quedan fuera de la apertura de objetivo. Es decir que supondremos que las variaciones de los vectores de onda de los electrones difundidos inelásticamente son muy grandes, de manera que todos ellos son suficientemente desviados como para no pasar por la apertura de objetivo.

Las observaciones experimentales no pueden explicarse por medio de un coeficiente medio de absorción. Por ejemplo, si los perfiles de intensidad de la Figura II.7 se multiplicaran por un factor

$$e^{-\mu_0 t}$$

donde μ_0 es un coeficiente de absorción promedio, volveríamos a obtener las mismas curvas aunque en una escala reducida. En este supuesto caso deberíamos observar, aumentando por supuesto el tiempo de exposición, franjas aún en cristales muy gruesos, hecho que no está confirmado en las observaciones experimentales. Tenemos que tratar, entonces, un fenómeno de ab-

sorción anómala.

Habíamos visto que las franjas de igual espesor se producían por un efecto de interferencia entre los dos tipos de onda en el cristal. Si una de estas ondas es absorbida más rápidamente que la otra a lo largo del espesor de la muestra, las franjas desaparecerán mucho antes que la onda de mayor penetración sea completamente absorbida. Entonces, las observaciones experimentales pueden explicarse si se supone que las ondas de tipo (1) del cristal, tienen un coeficiente de absorción diferente del de las ondas de tipo (2).

La razón física de estos coeficientes diferentes reside en el hecho de que las ondas de tipo (1) corresponden a un flujo de electrones concentrado entre los planos atómicos, Figura II.5, mientras que las del tipo (2) se concentran sobre los planos atómicos. Entonces es muy razonable suponer que la mayoría de los procesos de difusión inelástica están localizados en los planos atómicos, y por lo tanto se puede esperar que las ondas de tipo (2) serán dispersadas más rápidamente que las de tipo (1).

En la Figura II.5 se puede ver que el flujo electrónico asociado con cada tipo de onda se hace más uniforme a medida que aumenta la desviación de la posición de Bragg. Para una desviación suficientemente grande, los electrones asociados a cada tipo de onda tendrán la misma probabilidad de ser dispersados inelásticamente. Por lo tanto los coeficientes de absorción de las dos ondas deberán ser función del parámetro de desviación x , y la diferencia entre los mismos deberá ser máxima para $x = 0$, y nula para x muy grande.

Veremos que se puede expresar el coeficiente de absorción para cada campo de ondas, en la forma

$$\mu_j = \mu_0 + (-1)^j \Delta\mu_g(x) \quad (\text{II.31})$$

donde $j = 1, 2$ según la rama correspondiente, μ_0 es el coeficiente de absorción medio, y $\Delta\mu_g(x)$ es el coeficiente de absorción anómala, que depende de \vec{g} y x . El problema siguiente es el de calcular μ_j .

Consideremos primero un electrón propagándose en un medio absorbente en el cual los coeficientes de Fourier U_g , $g \neq 0$, del potencial cristallino sean nulos. La función de onda del electrón, suponiendo que viaja en la dirección z , es

$$\exp 2 \pi i K_z z$$

donde K es el vector de onda corregido por refracción por el término U_0 .

dos nuevos parámetros

$$\xi'_0 = \frac{K \cos \theta_B}{U'_0} \quad \xi'_g = \frac{K \cos \theta_B}{U'_g} \quad (\text{II.35})$$

cuyo significado físico veremos más adelante.

Recordando que

$$\begin{aligned} k_j - K &= (k_z^{(j)} - K_z) \cos \theta_B = \gamma_j \cos \theta_B \\ K^2 - k^2 &\equiv K^2 - (K + \gamma \cos \theta_B)^2 = K^2 - K^2 - 2K\gamma \cos \theta_B - \underbrace{\gamma^2 \cos^2 \theta_B}_{=0} = -2K\gamma \cos \theta_B \\ K^2 - (\bar{k} + \bar{g})^2 &= K^2 - (k - s \cos \theta_B)^2 = K^2 - (K + k - K - s \cos \theta_B)^2 = K^2 - (K + \gamma \cos \theta_B - s \cos \theta_B)^2 \\ &= K^2 - (K + (\gamma - s) \cos \theta_B)^2 \approx 2K(s - \gamma) \cos \theta_B \end{aligned}$$

entonces el determinante II.34 resulta

$$\begin{vmatrix} -2K\gamma \cos \theta_B + i U'_0 & U_{-g} + i U'_{-g} \\ U_g + i U'_g & 2K(s - \gamma) \cos \theta_B + i U'_0 \end{vmatrix} = 0$$

dividiendo por $2K \cos \theta_B$

$$\begin{vmatrix} -\gamma_j + \frac{i}{2\xi'_0} & \frac{1}{2\xi'_g} + \frac{i}{2\xi'_g} \\ \frac{1}{2\xi'_g} + \frac{i}{2\xi'_g} & (s - \gamma_j) + \frac{i}{2\xi'_0} \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{II.36})$$

Desarrollando el determinante

$$\begin{aligned} &\left[-\gamma_j + \frac{i}{2\xi'_0} \right] \left[(s - \gamma_j) + \frac{i}{2\xi'_0} \right] - \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\xi'_g} + \frac{i}{\xi'_g} \right]^2 = 0 \\ &= \gamma_j^2 - s\gamma_j - i \frac{\gamma_j}{2\xi'_0} + \frac{is}{2\xi'_0} - \frac{1}{4} \frac{1}{\xi_0'^2} - \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\xi'_g} + \frac{i}{\xi'_g} \right]^2 \\ &= \left\{ \gamma_j - \frac{i}{2\xi'_0} \right\}^2 - s \left\{ \gamma_j - \frac{i}{2\xi'_0} \right\} - \frac{1}{4} \left\{ \frac{1}{\xi'_g} + \frac{i}{\xi'_g} \right\}^2 = 0 \end{aligned}$$

Resolviendo esta ecuación de segundo grado en $\left\{ \gamma_j - \frac{i}{2\xi'_0} \right\}$, y con las aproximaciones

$$V(\bar{r}) \gg V'(\bar{r}) \quad \xi'_g \gg \xi_g$$

resulta

$$\underline{\gamma}_j = \frac{1}{2\xi'_g} \left\{ x + (-1)^j \sqrt{1+x^2} \right\} + \frac{i}{2} \left\{ \frac{1}{\xi'_0} + (-1)^j \frac{1}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \right\} \quad (\text{II.37})$$

donde $\underline{\gamma}_j$ es el valor complejo de la diferencia

$$k_2^{(j)} - K_2$$

Podemos calcular ahora las amplitudes de las ondas directa y difractada a una cierta profundidad t dentro del cristal

$$\text{directa : } \phi_0(t) = \theta_1 C_0^{(1)} \exp 2ni \gamma_1 t + \theta_2 C_0^{(2)} \exp 2ni \gamma_2 t$$

$$\text{difractada : } \phi_g(t) = \theta_1 C_g^{(1)} \exp 2ni \gamma_1 t + \theta_2 C_g^{(2)} \exp 2ni \gamma_2 t$$

La única diferencia es que ahora $\underline{\gamma}_j$ es una magnitud compleja. La parte real de la ec. II.37 debe ser la misma que γ_j , valor obtenido anteriormente. Entonces se puede escribir

$$\underline{\gamma}_j = \gamma_j + \frac{i}{2} \left\{ \frac{1}{\xi'_0} + \frac{(-1)^j}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \right\}$$

Las amplitudes de las ondas resultan finalmente

$$\phi_0(t) = \exp \frac{-nt}{\xi'_0} \left\{ \theta_1 C_0^{(1)} \exp \frac{nt}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni \gamma_1 t + \theta_2 C_0^{(2)} \exp \frac{-nt}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni \gamma_2 t \right\}$$

$$\phi_g(t) = \exp \frac{-nt}{\xi'_0} \left\{ \theta_1 C_g^{(1)} \exp \frac{nt}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni \gamma_1 t + \theta_2 C_g^{(2)} \exp \frac{-nt}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni \gamma_2 t \right\} \quad (\text{II.38})$$

La única diferencia entre las ecuaciones II.38 y las correspondientes al caso del cristal sin absorción, ec. II.29, es que las ondas de las diferentes ramas de la superficie de dispersión están multiplicadas por los factores

$$\exp(-K_j t) = \exp \left\{ \frac{-nt}{\xi'_0} - \frac{(-1)^j nt}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \right\}$$

Estos son los factores de atenuación que multiplican las amplitudes de las ondas (1) y (2) para $j = 1, 2$ respectivamente. Por lo tanto

$$K_1 \quad \text{y} \quad K_2$$

son los coeficientes de absorción de las amplitudes, y son diferentes para ondas excitadas en diferentes ramas de la superficie de absorción. Este es el resultado requerido para una descripción matemática de la absorción anómala, ya que κ_1 es menor que κ_2 , lo que está de acuerdo con los resultados cualitativos deducidos a partir de las densidades de corriente asociadas a las ondas de Bloch.

Ahora es posible dar un significado físico a los parámetros ξ'_0 y ξ'_g . El término

$$\frac{\pi t}{\xi'_0}$$

es común a κ_1 y κ_2 , y el factor

$$\exp\left(-\frac{\pi t}{\xi'_0}\right)$$

multiplica igualmente a las dos ondas, ec. II.38. Entonces

$$2 \times \frac{\pi}{\xi'_0}$$

se comporta como un coeficiente medio de absorción de la intensidad. La cantidad ξ'_0 tiene dimensiones de longitud, y se llama distancia media de absorción. De la misma manera, ξ'_g controla la magnitud de la absorción anómala, y se llama distancia de absorción anómala. Los valores límites de κ_j proporcionan información acerca de los valores relativos de ξ'_0 y ξ'_g . κ_1 debe ser positivo, pues sino habría creación de electrones dentro del cristal, y por lo tanto

$$\xi'_g \geq \xi'_0$$

Cuando $\xi'_0 = \xi'_g$ entonces $\kappa_2 - \kappa_1$ es también máximo, y la absorción es también máxima. Para $\xi'_g \rightarrow \infty$ no hay absorción anómala, pues entonces

$$\kappa_1 = \kappa_2$$

INTENSIDADES EN CAMPO CLARO Y CAMPO OSCURO

Ahora podemos calcular las intensidades en campo claro y campo oscuro para el caso de un cristal perfecto. Las amplitudes correspondientes se pueden expresar entonces

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= \theta_1 C_0^{(u)} \exp \frac{\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2\pi i \gamma_1 t + \theta_2 C_0^{(u)} \exp \frac{-\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2\pi i \gamma_2 t \\ &= \cos^2 \frac{\beta}{2} \exp \frac{\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2\pi i \gamma_1 t + \sin^2 \frac{\beta}{2} \exp \frac{-\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \exp 2\pi i \gamma_2 t \\ &= \exp \frac{-\pi t}{\xi'_0} \left\{ \cos^2 \frac{\beta}{2} \exp \frac{\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \cos 2\pi \gamma_1 t + \sin^2 \frac{\beta}{2} \exp \frac{-\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \cos 2\pi \gamma_2 t \right\} + \\ &\quad + i \exp \frac{-\pi t}{\xi'_0} \left\{ \cos^2 \frac{\beta}{2} \exp \frac{\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \sin 2\pi \gamma_1 t + \sin^2 \frac{\beta}{2} \exp \frac{-\pi t}{\xi'_g \sqrt{1+x^2}} \sin 2\pi \gamma_2 t \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi_g(t) &= \theta_1 C_g^{(1)} \exp \frac{\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni\gamma_1 t + \theta_2 C_g^{(2)} \exp \frac{-\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni\gamma_2 t \\
&= -\cos \frac{\beta}{2} \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \exp \frac{\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni\gamma_1 t + \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \exp \frac{-\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \exp 2ni\gamma_2 t \\
&= \exp \frac{-\pi t}{\xi_g'} \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \left\{ -\exp \frac{\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \cos 2n\gamma_1 t + \exp \frac{-\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \cos 2n\gamma_2 t \right\} + \\
&\quad + i \exp \frac{-\pi t}{\xi_g'} \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \left\{ -\exp \frac{\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \operatorname{sen} 2n\gamma_1 t + \exp \frac{-\pi t}{\xi_g' \sqrt{1+x^2}} \operatorname{sen} 2n\gamma_2 t \right\}
\end{aligned} \tag{II.39}$$

Desarrollando los términos exponenciales

$$\phi_0(t) = \exp \frac{-\pi t}{\xi_g'} \left\{ \cos X - i \cos \beta \operatorname{sen} X \right\}$$

$$\phi_g(t) = \exp \frac{-\pi t}{\xi_g'} \left\{ i \operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} X \right\}$$

donde

$$X = \pi t \operatorname{cosec} \frac{\beta}{\xi_g} + i \pi t \operatorname{sen} \frac{\beta}{\xi_g'}$$

Las intensidades, transmitida y difractada, resultan entonces

$$\begin{aligned}
|\phi_0(t)|^2 &= \exp \frac{-2\pi t}{\xi_g'} \left\{ \cos^4 \frac{\beta}{2} \exp 2\pi t \operatorname{sen} \frac{\beta}{\xi_g} + \operatorname{sen}^4 \frac{\beta}{2} \exp (-2\pi t \operatorname{sen} \frac{\beta}{\xi_g}) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \operatorname{sen}^2 \beta \cos (2\pi t \operatorname{cosec} \frac{\beta}{\xi_g}) \right\}
\end{aligned} \tag{II.40/a}$$

$$|\phi_g(t)|^2 = \frac{1}{2} \exp \frac{-2\pi t}{\xi_g'} \operatorname{sen}^2 \beta \left\{ \cosh (2\pi t \operatorname{sen} \frac{\beta}{\xi_g}) - \cos (2\pi t \operatorname{cosec} \frac{\beta}{\xi_g}) \right\} \tag{II.40/b}$$

Los perfiles de intensidad de las franjas de igual espesor (x fijo, t variable) y de las franjas de igual inclinación (x variable, t fijo) obtenidos a partir de las ecuaciones (II.40), se muestran en las Figuras II.9 y II.10.

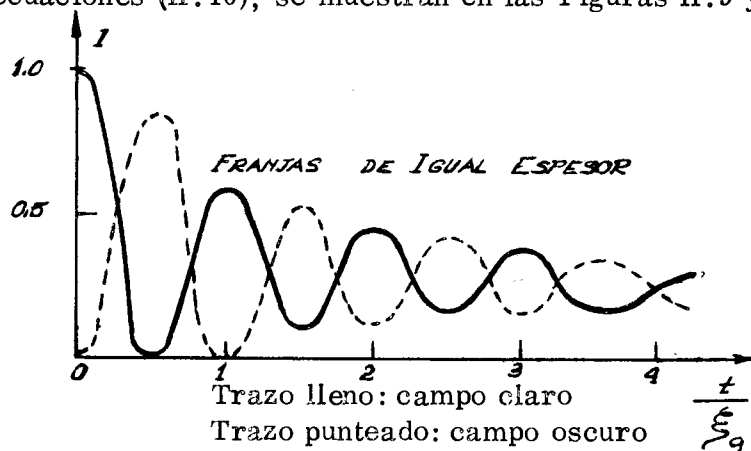


Figura II.9

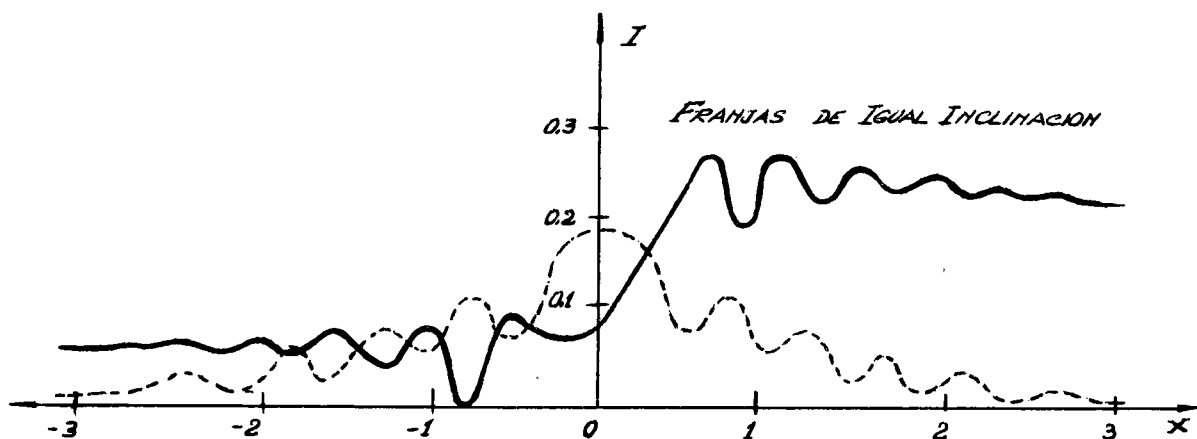


Figura II.10

La forma detallada de los perfiles depende de los valores de ξ'_0 y ξ'_g . Para obtener buen acuerdo con los resultados experimentales se suele tomar

$$\xi'_0 \approx 10 \xi'_g \quad \xi'_g \approx 15 \xi'_g$$

Finalmente, notemos que la ec. II.40/a predice una imagen en campo claro que es asimétrica alrededor de $x = 0$. Este resultado es consecuencia directa de la absorción anómala.

III EL CRISTAL IMPERFECTO

III.1 La matriz de difusión

La aplicación de la teoría dinámica al estudio de cristales que contienen algún tipo de defecto, fallas de apilamiento, cavidades, etc. se ve facilitada con el uso del álgebra matricial. Antes de tratar el caso del cristal imperfecto, expresaremos las ecuaciones de las amplitudes difractada y transmitida en forma matricial. Se verá entonces, que es posible relacionar las amplitudes de la onda incidente sobre la superficie superior del cristal con las amplitudes de las ondas emergentes de la superficie inferior, por medio de una matriz denominada matriz de difusión (scattering matrix). Este formulismo resultará particularmente útil en el caso de cristales deformados.

Las ecuaciones II.29 que daban las amplitudes de las ondas transmitida y difractada, a una profundidad t dentro del cristal

$$\phi_0(t) = \theta_1 C_0^{(1)} \exp 2ni \underline{\gamma}_1 t + \theta_2 C_0^{(2)} \exp 2ni \underline{\gamma}_2 t$$

$$\phi_g(t) = \theta_1 C_g^{(1)} \exp 2ni \underline{\gamma}_1 t + \theta_2 C_g^{(2)} \exp 2ni \underline{\gamma}_2 t$$

pueden expresarse en forma matricial

$$\begin{pmatrix} \phi_0(t) \\ \phi_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_0^{(\omega)} & C_0^{(\omega)} \\ C_3^{(\omega)} & C_3^{(\omega)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp 2ni \underline{\gamma}_1 t & 0 \\ 0 & \exp 2ni \underline{\gamma}_2 t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} \quad (\text{III.1})$$

donde los $\underline{\gamma}_j$ son complejos, puesto que estamos considerando el caso de un cristal absorbente. Los valores de θ_j pueden expresarse en términos de las amplitudes incidentes $\phi_0(\omega)$ y $\phi_3(\omega)$ usando las ecuaciones II.25, las cuales pueden expresarse en forma matricial

$$\begin{pmatrix} C_0^{(\omega)} & C_0^{(\omega)} \\ C_3^{(\omega)} & C_3^{(\omega)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_0(\omega) \\ \phi_3(\omega) \end{pmatrix} \quad (\text{III.2})$$

Si la matriz cuyos elementos son $C_0^{(\omega)}$ y $C_3^{(\omega)}$ se denomina \underline{C} , entonces en la ecuación anterior se puede despejar la matriz correspondiente a los θ_j , multiplicando ambos miembros por la matriz inversa \underline{C}^{-1} .

$$\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} = \underline{C}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_0(\omega) \\ \phi_3(\omega) \end{pmatrix}$$

que da como resultado

$$\begin{pmatrix} \phi_0(t) \\ \phi_3(t) \end{pmatrix} = \underline{C} \begin{pmatrix} \exp 2ni \underline{\gamma}_1 t & 0 \\ 0 & \exp 2ni \underline{\gamma}_2 t \end{pmatrix} \underline{C}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_0(\omega) \\ \phi_3(\omega) \end{pmatrix} = \underline{S}(t) \begin{pmatrix} \phi_0(\omega) \\ \phi_3(\omega) \end{pmatrix}$$

La matriz $\underline{S}(t)$ se denomina matriz de difusión, puesto que relaciona las amplitudes de la onda incidente con las amplitudes de las ondas emergentes de la superficie inferior del cristal.

III.2 Fallas de apilamiento

La utilidad del método de la matriz de difusión se hace ver en el caso de un cristal que contiene una falla de apilamiento. Consideraremos primero el caso especial de una falla paralela a las superficies de la lámina, situada a una profundidad t_1 , Figura III.1.

Para calcular las intensidades $|\phi_0(\omega)|^2$ y $|\phi_3(\omega)|^2$ se sigue este procedimiento :

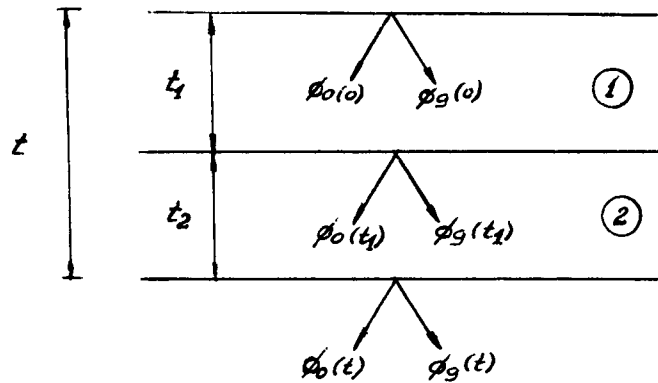


Figura III.1

- 1 / Se calculan las matrices de difusión $\underline{S}(t_1)$ y $\underline{S}(t_2)$ para las dos porciones de cristal perfecto de espesores t_1 y t_2 , respectivamente.
- 2 / A continuación se calculan las amplitudes $\phi_0(t_1)$ y $\phi_g(t_1)$ mediante las ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \phi_0(t_1) \\ \phi_g(t_1) \end{pmatrix} = \underline{S}(t_1) \begin{pmatrix} \phi_0(0) \\ \phi_g(0) \end{pmatrix}$$

- 3 / Con los valores de $\phi_0(t_1)$ y $\phi_g(t_1)$ se calculan $\phi_0(t)$ y $\phi_g(t)$ mediante

$$\begin{pmatrix} \phi_0(t) \\ \phi_g(t) \end{pmatrix} = \underline{S}(t_2) \begin{pmatrix} \phi_0(t_1) \\ \phi_g(t_1) \end{pmatrix}$$

Las operaciones anteriores pueden expresarse en forma de ecuación

$$\begin{pmatrix} \phi_0(t) \\ \phi_g(t) \end{pmatrix} = \underline{S}(t_2) \underline{S}(t_1) \begin{pmatrix} \phi_0(0) \\ \phi_g(0) \end{pmatrix} \quad (\text{III.4})$$

y puede verse que las amplitudes emergentes del cristal, se obtienen multiplicando las matrices de difusión de los dos cristales perfectos en el orden correcto.

La matriz $\underline{S}(t_1)$ se calcula rápidamente, puesto que los elementos de $\underline{C}(1)$ y $\underline{C}^{-1}(1)$, para el cristal (1), ya fueron calculados, ec. II.20. Entonces

$$\underline{S}(t_1) = \underline{C}(1) \begin{pmatrix} \exp 2ni \chi_1 t_1 & 0 \\ 0 & \exp 2ni \chi_1 t_1 \end{pmatrix} \underline{C}(1)^{-1}$$

donde

$$\underline{C}(1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & \sin \frac{1}{2} \beta \\ -\sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix} \quad \underline{C}^{-1}(1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & -\sin \frac{1}{2} \beta \\ \sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix}$$

Los elementos de $\underline{C}(1)$ fueron obtenidos tomando el origen de los vectores \vec{r} en un centro de simetría del cristal. Esta elección puede hacerse para el cristal (1). Sin embargo la parte inferior, cristal (2), está desplazada respecto de la parte superior en un vector \vec{R} , que no es un vector de traslación de la red, y por lo tanto la parte inferior no cumple con la primera condición. Hay que calcular entonces, para el cristal (2), los elementos de matriz de $\underline{C}(2)$ y $\underline{C}^{-1}(2)$. Esto se puede hacer fácilmente teniendo en cuenta que

$$\frac{C_g^{(2)}}{C_o^{(2)}} = 2K(k^{(2)} - K) / U_g$$

El potencial cristalino debe ser el mismo en puntos equivalentes de los cristales (1) y (2), ya que éstos son cristales idénticos,

$$V_{(1)}(\vec{r}) = V_{(2)}(\vec{r} + \vec{R})$$

donde los índices (1) y (2) se refieren a las partes superior e inferior, respectivamente. Desarrollando el potencial, obtenemos

$$\sum_g U_{\omega g} \exp 2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r} = \sum_g U_{\omega g} \exp 2\pi i \vec{g} \cdot (\vec{r} + \vec{R})$$

que para $-\vec{g}$ nos da

$$U_{\omega -\vec{g}} = U_{\omega \vec{g}} \exp i\alpha \quad (\text{III.3})$$

donde

$$\alpha = 2\pi \vec{g} \cdot \vec{R}$$

se denomina ángulo de fase de la falla. Con este valor de $U_{\omega -\vec{g}}$ en la ecuación de $C_g(j) / C_o(j)$ se obtiene

$$\underline{C}(2) = \begin{pmatrix} C_o^{(2)} & C_o^{(2)} \\ C_g^{(2)} \exp -i\alpha & C_g^{(2)} \exp -i\alpha \end{pmatrix} \quad (\text{III.4})$$

donde los valores de $C_o^{(2)}$ y $C_g^{(2)}$ son los mismos que para el cristal (1).

Los valores de $\phi_0(t)$ y $\phi_g(t)$ pueden calcularse ahora a partir de la ecuación (III.4) con los elementos de matriz últimos, y con $\phi_0(0) = 1$ y $\phi_g(0) = 0$. Las amplitudes de las ondas directa y difractada, resultan finalmente, omitiendo factores exponenciales constantes,

$$\phi_0(t) = \left\{ [\cos \eta \Delta k t - i \cos \beta \operatorname{sen} \eta \Delta k t] + \frac{1}{2} \operatorname{sen}^2 \beta (\exp i\alpha - 1) \cos \eta \Delta k t - \frac{1}{2} \operatorname{sen}^2 \beta (\exp i\alpha - 1) \cos 2\eta \Delta k t' \right\} \exp \frac{-\pi t}{\xi_0} \quad (\text{III.5})$$

$$\phi_g(t) = \left\{ i \operatorname{sen} \beta (\eta \Delta k t) + \frac{1}{2} \operatorname{sen} \beta (1 - \exp -i\alpha) [\cos \beta \cos \eta \Delta k t - i \operatorname{sen} \eta \Delta k t] - \frac{1}{2} \operatorname{sen} \beta (1 - \exp -i\alpha) [\cos \beta \cos 2\eta \Delta k t' - i \operatorname{sen} 2\eta \Delta k t'] \right\} \exp \frac{-\pi t}{\xi_0}$$

donde

$$t' = t_1 - \frac{1}{2}t \quad \Delta k = \gamma_2 - \gamma_1 = \left(\frac{\sqrt{1+x^2}}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \sqrt{1+x^2} \right)$$

Consideraremos ahora el caso general de una falla inclinada respecto de las superficies del cristal, Figura III.2

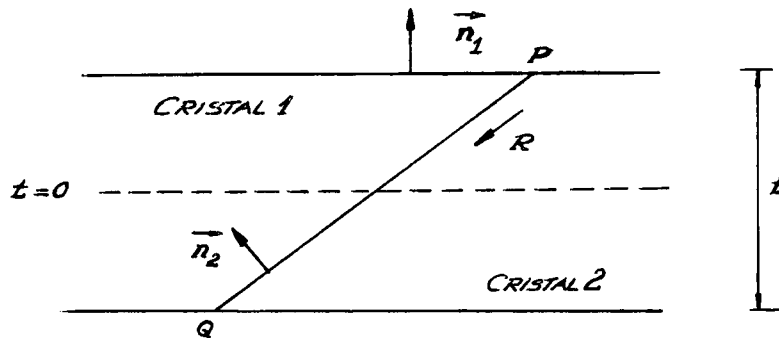


Figura III.2

La superficie de entrada al cristal (1) excita los puntos $D_1^{(1)}$ y $D_1^{(2)}$ en las ramas (1) y (2), Figura III.3. Estos puntos se obtienen mediante la construcción mencionada en II.2. Entonces, cuatro ondas se propagan en el cristal hasta llegar a la falla.

Los puntos excitados en las ramas (1) y (2) del cristal (2) se obtienen mediante una construcción similar. Se trazan los vectores \vec{n}_2 , paralelos a la normal de la falla, a partir de los puntos $D_1^{(1)}$ y $D_1^{(2)}$ de las ondas incidentes sobre la interfase, y los puntos de intersección de \vec{n}_2 con la superficie de dispersión dan las ondas excitadas en el segundo cristal. En la Figura III.3 se puede ver que estos puntos son $D_1^{(1)}$, $D_2^{(1)}$, $D_1^{(2)}$ y $D_2^{(2)}$ y por lo tanto, ocho ondas se propagan a través del cristal (2). El parámetro de desviación de la posición de Bragg es el mismo para los cuatro pun-

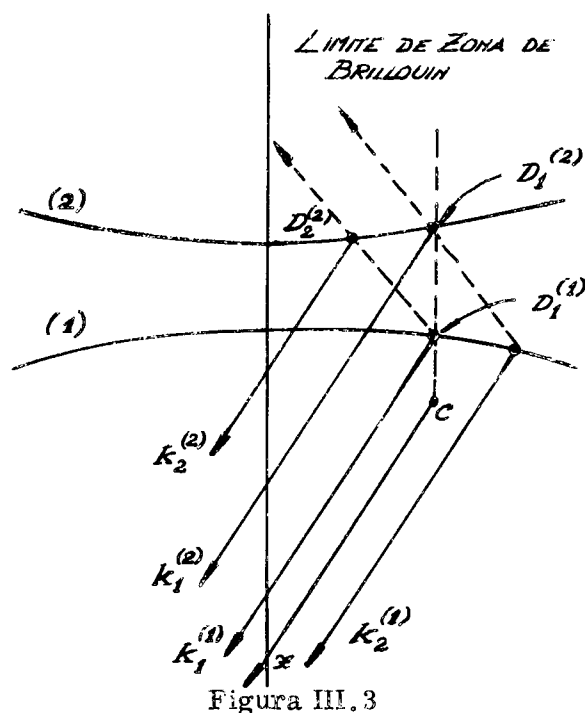


Figura III.3

tos solamente en el caso simétrico de Laue, y si la falla es paralela a las dos superficies del cristal, es decir η_1 y η_2 paralelos al límite de zona de Brillouin.

Parecería entonces que en el caso general de una falla inclinada, la interferencia entre las distintas ondas tendría que calcularse utilizando el valor de x o β correspondiente a cada onda excitada. Sin embargo, se puede demostrar que se puede utilizar un valor promedio del parámetro de desviación para describir las amplitudes $C_0^{(1)}$ y $C_0^{(2)}$ de las cuatro ondas, siempre que la inclinación de la falla no sea mayor que unos 85° . Esto es equivalente a suponer que los puntos $D_2^{(2)}$ y $D_2^{(1)}$ son coincidentes con los puntos $D_1^{(1)}$ y $D_1^{(2)}$, respectivamente.

La razón por la cual esta aproximación sigue valiendo aún para fallas tan inclinadas, se ilustra en la Figura III.4, donde el cristal se divide en columnas delgadas a, b, c, etc.

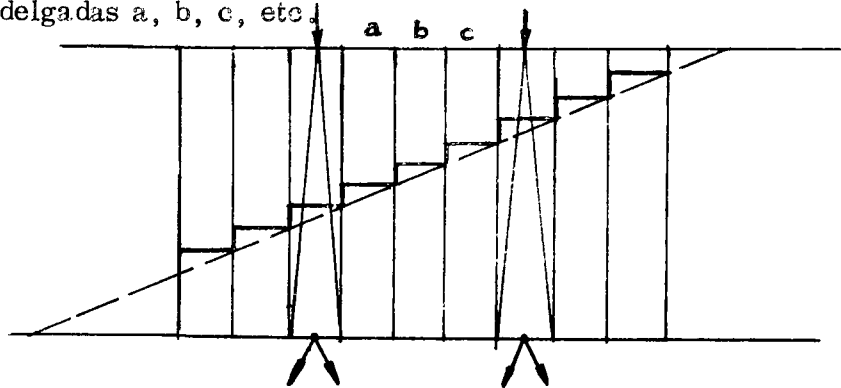


Figura III.4

El vector \vec{R} puede descomponerse según una dirección paralela y una dirección perpendicular a las superficies del cristal, y si las columnas son suficientemente angostas, las intensidades al pie de cada columna pueden calcularse suponiendo que la falla está descompuesta de la manera indicada en la Figura III.4. Cuanto más estrecha es cada columna, mayor es la inclinación que puede tolerarse antes que la aproximación deje de ser válida. El criterio para este límite es que el ancho de las columnas debe ser tal que las ondas que se propagan a lo largo de una columna dada, no penetren en las columnas adyacentes, pues sino interferirían ondas provenientes de porciones de falla situadas a distintas profundidades. En la práctica, las columnas pueden tomarse muy angostas puesto que los ángulos de Bragg son $\sim 10^{-2}$ rad., y tomando una lámina de 1000 \AA , un cálculo muy sencillo da un ancho límite de 20 \AA para las columnas.

Las intensidades de la imagen de una falla inclinada puede obtenerse entonces haciendo variar el valor de t' en las ecuaciones (III.5) entre $-1/2 t$ sobre la superficie superior, y $+1/2 t$ sobre la superficie inferior. Los perfiles de intensidad obtenidos calculando $|\phi_x(\omega)|^2$ y $|\phi_y(\omega)|^2$ a partir de estas ecuaciones se muestran en la Figura III.5. Las intensidades de las franjas son más débiles en los centros de las fallas, tanto para campo cla-

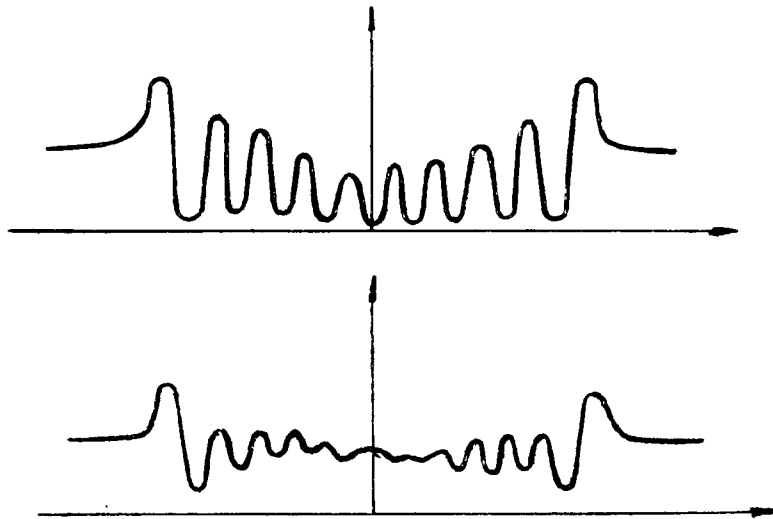


Figura III.5

ro como para campo oscuro. En cristales suficientemente gruesos prácticamente no se observa contraste en regiones centrales de la falla, mientras que las franjas son muy marcadas en las zonas donde la falla intersecta las superficies de la lámina, y este hecho se explica en la Figura III.6.

Consideremos las regiones (a), (b) y (c) en las cuales t' es igual a $\sim -1/2 t$, ~ 0 , y $\sim +1/2 t$ respectivamente. En la zona (a) la construcción de la figura muestra que $\vec{\chi}$ excita las ondas de vectores $\mathbf{K}_1^{(1)}$

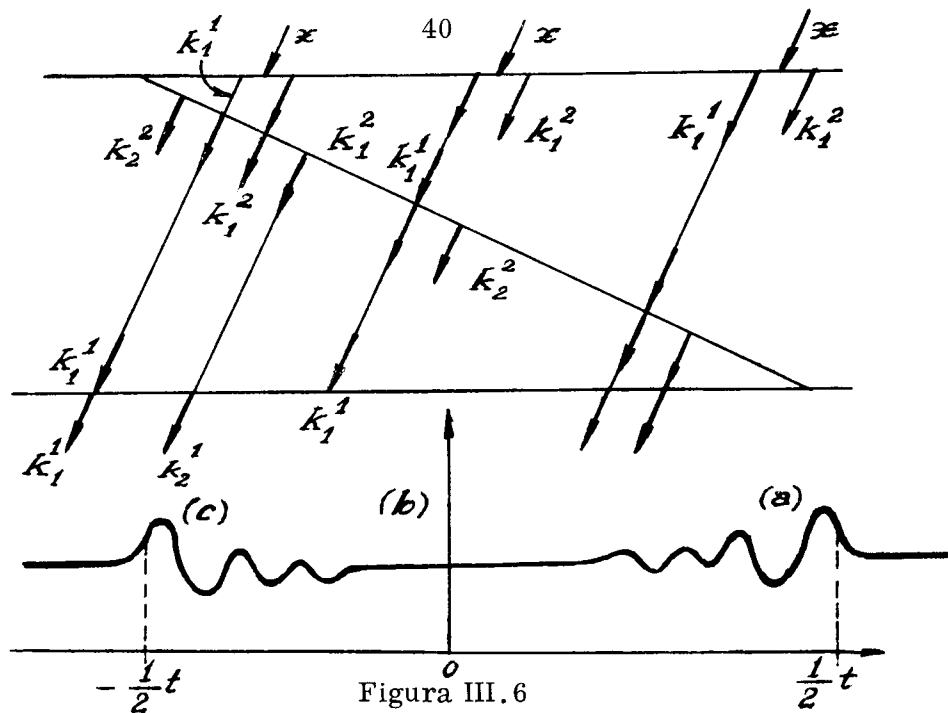


Figura III.6

y $k_1^{(2)}$. Si el cristal es muy grueso, la absorción anómala removerá la onda $k_1^{(2)}$, dejando solamente incidir sobre la falla a la onda k_1^1 . Esta onda excita el punto D_2^2 , y ya que el cristal (2) es delgado en la zona (a), las ondas dadas por los vectores k_1^1 y k_2^2 pasan a través de la superficie de salida. Estas ondas interfieren entre sí y por lo tanto las franjas son visibles. En la región (b), \vec{x} excita nuevamente k_1^1 y k_2^2 , pero solamente k_1^1 llega al plano de la falla debido a la absorción anómala, y entonces se excitan las ondas k_1^1 y k_2^2 en el cristal 2. En esta región el cristal 2 es suficientemente grueso de manera que solamente la onda k_1^1 llega a la superficie de salida. No existe posibilidad de interferencia, y por lo tanto no existen franjas. En la región (c), debido a que el cristal 1 es delgado, k_1^1 y k_2^2 excitan las cuatro ondas de la Figura III.6. Dos de estas ondas, k_2^2 y k_2^1 , son removidas por la absorción, y por lo tanto solamente k_1^1 y k_2^1 llegan a la superficie de salida. El factor $\exp(-i\alpha)$ en la ecuación III.4 muestra que existe una diferencia de fase entre las dos ondas y por lo tanto, la interferencia produce franjas.

III.3 Otros defectos planos - El cristal deformado continuamente.

El método de la matriz de difusión puede aplicarse inmediatamente al caso de otros defectos planos, como límites de macla, cristales superpuestos (diagramas de Moiré), cavidades, etc. Las intensidades obtenidas para todos estos casos son muy similares a las correspondientes a una falla de apilamiento. En el caso de una macla, por ejemplo, el cálculo de la intensidad puede hacerse suponiendo un cambio brusco del parámetro de desviación de Bragg sobre la superficie límite.

El mismo método puede utilizarse también para el cristal deformado continuamente. El problema puede tratarse considerando primero el caso de un cristal que contiene un cierto número de fallas de apilamiento superpuestas, Figura III.7.

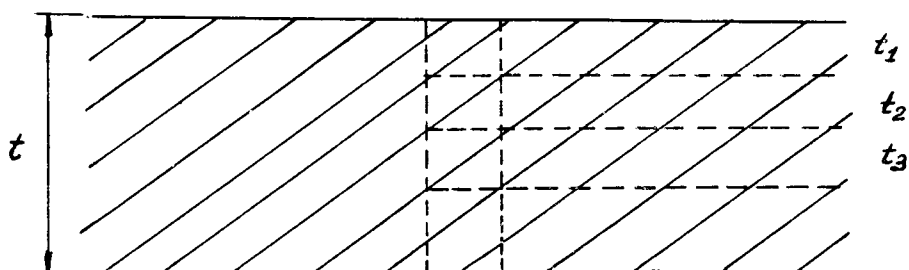


Figura III.7

Supongamos que n fallas cortan a la columna indicando en la figura, y que los espesores de las porciones de cristal perfecto comprendidas entre fallas sucesivas son t_1 , t_2 , etc. Entonces, la matriz de difusión para esta columna es

$$\underline{S}(t) = \underline{S}(t_n) \dots \underline{S}(t_2) \underline{S}(t_1)$$

y las amplitudes sobre la superficie inferior de la lámina pueden calcularse mediante la ec. III.4.

Si el número n de porciones de cristal perfecto es suficientemente grande, el problema anterior se aproxima al del cristal deformado continuamente. Entonces, por ejemplo, el cálculo de las intensidades de la imagen de un cristal que contiene una dislocación D , Figura III.8 paralela a las superficies de la lámina en un cierto punto $(0, z_D)$, puede hacerse mediante la aproximación de la matriz de difusión. El cristal se divide en columnas, y las amplitudes sobre la superficie de salida del haz se calculan a partir de las matrices de difusión en la base de cada columna.

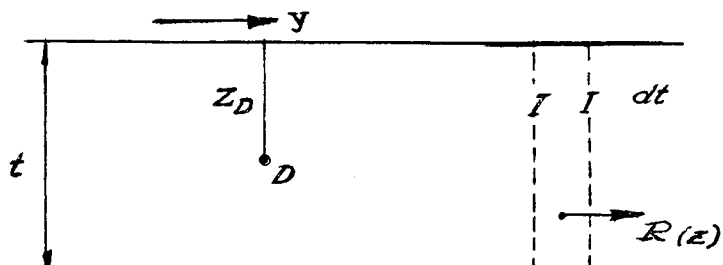


Figura III.8

La matriz $\underline{S}(t)$ para una columna dada se obtiene dividiendo el cristal en pequeñas porciones de espesor dt . Se supone que cada una de estas láminas es un cristal perfecto, y el ángulo de fase $\alpha = 2\pi \vec{g} \cdot \vec{R}(z)$ para cada interfase se obtiene considerando que la lámina situada a una profundidad z está desplazada en $\vec{R}(z)$, el desplazamiento en (y, z) producido por la dislocación situada en $(0, z_0)$. Las amplitudes pueden calcularse numéricamente, y entonces el problema de la difracción en un cristal con defectos está, al menos en principio, resuelto.

IV TEORIA DE VARIOS HACES

IV.1 El cristal perfecto.

Aunque la aproximación de dos haces provee una descripción cualitativa bastante buena sobre el contraste de distintos defectos cristalinos, ciertos detalles de las imágenes solo pueden explicarse considerando la existencia de más de dos haces dentro del cristal. Los efectos de varios haces se hacen más importantes a medida que aumenta la tensión de aceleración de los electrones. Por ejemplo, para explicar los contornos de extinción que aparecen en un cristal deformado, observado a 700 kV, es necesario utilizar en el cálculo por lo menos 50 haces difractados.

La razón de ésto la veremos a continuación. Consideremos las reflexiones sistemáticas de tipo $n\vec{g}$, donde $n = 3, -2, \dots, 2, 3$, correspondientes a la columna de nodos recíprocos $-3\vec{G}, -2\vec{G}, \dots, 2\vec{G}, 3\vec{G}$. La distribución de intensidades en función de $x = s\xi_g$ ya ha sido calculada, ver Figura II.10. Esta distribución puede graficarse también a lo largo del vector s en el espacio recíproco, Figura IV.1.

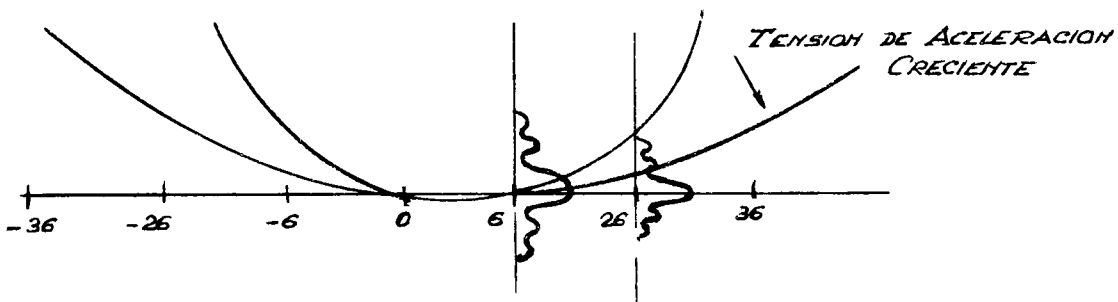


Figura IV.1

Para una orientación dada del cristal, la intensidad de cada haz difractado estará dada por la intensidad correspondiente al punto de intersección de la esfera de Ewald con \vec{s} . El ancho del pico de intensidades para $s = 0$ es generalmente del orden de $\sim 2/\xi_{ng}$. Entonces si la esfera de

Ewald está situada a una distancia menor que $2/\xi_{ng}$ del nodo recíproco nG , los efectos de varios haces se harán importantes. Para energías bajas de los electrones, la esfera de Ewald tiene un radio relativamente pequeño, y entonces es posible excitar solamente un haz difractado fuerte. Cuando la energía de los electrones es grande, la esfera de Ewald tiene un radio mayor, y entonces podrán excitarse simultáneamente varias reflexiones de alto orden.

Para un potencial de aceleración fijo, la importancia de los efectos de varios haces está determinada por los valores de \vec{g} y U_g . Consideremos el caso de un cristal orientado de tal manera que la esfera de Ewald es equidistante de las reflexiones \vec{g} y $-\vec{g}$, o sea que $S_{-g} = S_g$, Figura IV.2. Las reflexiones \vec{g} y $-\vec{g}$ están excitadas igualmente, y si $x < 1$, ambos haces tendrán que considerarse para describir el contraste de la imagen.

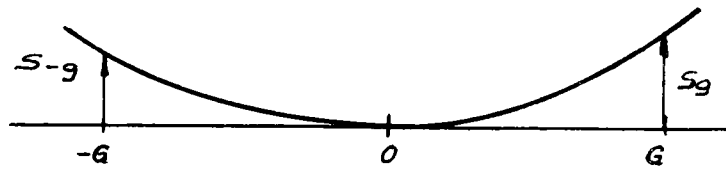


Figura IV.2

De la geometría de la Figura IV.2 se puede ver fácilmente que

$$S = -g \theta_B = \frac{-g^2}{2K} \quad x = S \xi_g = \frac{-g^2}{2U_g}$$

para ambas reflexiones. Los valores de $g^2/2U_g$ para las reflexiones (111) del Al y del Au para un potencial de 100 kV son 1,89 y 0,5 respectivamente. Por lo tanto, la aproximación de dos haces es válida para el Al pero no para Au, para esta tensión de aceleración.

Consideraremos ahora la formulación matemática de la teoría de varios haces. Primero hay que tener en cuenta que en el caso de n haces, la superficie de dispersión tiene n ramas, ya que las amplitudes C_g tienen que satisfacer las n ecuaciones II.33. Generalmente es imposible seguir esta teoría por medios analíticos, y por lo tanto los cálculos se realizan en forma numérica. Para ayudar este cálculo conviene usar la notación matricial. A partir de la superficie de dispersión tenemos

$$K^2 - k_j^2 \approx -2K_j \cos \theta_{Bg}$$

$$K^2 - (\bar{k}_j + \bar{g})^2 \approx 2K (S_g - \delta_j) \cos \theta_{Bg}$$

donde ahora se ha puesto en forma explícita el subíndice \vec{g} , ya que \vec{s} y θ_0 dependen de la reflexión \vec{g} , y existe un número n de las mismas. Usando estas aproximaciones, las ecuaciones II.33 pueden escribirse en forma matricial

$$\underline{A} \left\{ C_g^{(j)} \right\} - \gamma^{(j)} \left\{ C_g^{(j)} \right\} = 0 \quad j=1,2,\dots,n \quad (\text{IV.1})$$

donde $\left\{ C_g^{(j)} \right\}$ es una matriz columna de elementos $C_g^{(j)}$, $\gamma^{(j)} = k_z^j - K_z$ y \underline{A} es una matriz de elementos diagonales.

$$A_{00} = \frac{i}{2\xi'_{g-h}} \quad A_{gg} = S_g + \frac{i}{2\xi'_0}$$

y elementos no diagonales

$$A_{gh} = \frac{1}{2\xi'_{g-h}} + \frac{i}{2\xi'_{g-h}}$$

Para fijar ideas escribiremos las matrices que aparecen en esta ecuación para un caso particular. Para las reflexiones sistemáticas, $-g$, 0 , g , $2g$, la ecuación IV.1 es

$$\begin{pmatrix} \frac{i}{2\xi'_0} & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_{-2g}} + \frac{i}{\xi'_{-2g}}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right) & S_g + \frac{i}{2\xi'_0} & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_{2g}} + \frac{i}{\xi'_{2g}}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_{-2g}} + \frac{i}{\xi'_{-2g}}\right) & S_g + \frac{i}{2\xi'_0} & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_{-2g}} + \frac{i}{\xi'_{-2g}}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_{2g}} + \frac{i}{\xi'_{2g}}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_{2g}} + \frac{i}{\xi'_{2g}}\right) & S_{2g} + \frac{i}{2\xi'_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^j \\ C_g^j \\ C_g^j \\ C_{2g}^j \end{pmatrix} = \gamma^j \begin{pmatrix} C_0^j \\ C_g^j \\ C_g^j \\ C_{2g}^j \end{pmatrix}$$

que puede simplificarse más aún para un cristal centrosimétrico pues $\xi_{ng} = \xi_{-ng}$

Los valores de γ^j se calculan usando la condición determinante $|\underline{A}|=0$ para las soluciones no triviales de C_g^j , tal como fué hecho en el caso de dos haces, e igualmente se necesita un criterio de normalización puesto que a partir de la ecuación IV.1 solamente se obtienen los cocientes C_g^j / C_0^j . En el caso de n haces este criterio se determina inmediatamente teniendo en cuenta que la ec. IV.1 es una ecuación de autovalores similar a la ecuación de Schrödinger

$$\underline{H} \{ \psi \} = E \{ \psi \}$$

y entonces los elementos de $\{ C_g^j \}$ cumplen las relaciones de ortonormalización de las funciones ψ . Estas relaciones son

$$\sum_g C_g^i * C_g^j = \delta_{ij} \quad (\text{IV.2})$$

$$\sum_j C_g^j * C_h^j = \delta_{gh}$$

La ecuación IV.2 (a) es la relación de normalización de la aproximación de dos haces, sección II.3. Para escribir las relaciones anteriores en forma matricial, definiremos una matriz \underline{C} cuyas columnas son los elementos de los vectores columna de las ecuaciones IV.1, o sea

$$\underline{C} = \begin{pmatrix} C_0^{(1)} & C_0^{(2)} & C_0^{(3)} & \dots \\ C_g^{(1)} & C_g^{(2)} & C_g^{(3)} & \dots \\ C_h^{(1)} & C_h^{(2)} & C_h^{(3)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{IV.3})$$

La matriz traspuesta de \underline{C} es

$$\underline{C}^T = \begin{pmatrix} C_0^{(1)} & C_g^{(1)} & C_h^{(1)} & \dots \\ C_0^{(2)} & C_g^{(2)} & C_h^{(2)} & \dots \\ C_0^{(3)} & C_g^{(3)} & C_h^{(3)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

y entonces la forma matricial de IV.2 es

$$\underline{C}^T \underline{C} = \underline{I} \quad (\text{IV.4})$$

donde \underline{I} es la matriz unitaria. Las ecuaciones IV.1 y IV.4 pueden resolverse por métodos convencionales del cálculo matricial, y obtener así las amplitudes C_g^j . Para calcular las intensidades de las imágenes es necesario conocer también los coeficientes de excitación θ^j de las ondas de Bloch. Estos, al igual que en el caso de dos haces, quedan determinadas por las condiciones de contorno. Para el cristal perfecto, la amplitud $\phi_0(\omega)$ de la onda incidente es igual a uno, y las amplitudes $\phi_g(\omega)$, $\phi_h(\omega)$, etc. de las ondas difractadas son iguales a cero.

En un cristal imperfecto, sin embargo, las condiciones en los bordes deben plantearse también en el interior del cristal. Entonces, consideraremos el caso general donde $\phi_g(z)$, $\phi_h(z)$, tienen valores distintos de cero. Las condiciones de contorno, igual que en la aproximación de dos haces, conducen a las ecuaciones

$$\sum_j \theta^j C_g^j = \phi_g(z)$$

que en forma matricial se expresan

$$\underline{C} \underline{\theta} = \underline{\Phi} \quad (\text{IV.5})$$

donde \underline{C} está definida en (IV.3), $\underline{\theta}$ es un vector columna de elementos $\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots$, etc. y $\underline{\Phi}$ es un vector columna de elementos $\phi_0(z), \phi_1(z), \dots$, etc. Multiplicando (IV.5) por \underline{C}^{-1} , obtendremos $\underline{\theta} = \underline{C}^{-1} \underline{\Phi}$, y según las relaciones de ortogonalidad $\underline{\tilde{C}} \underline{C} = \underline{I}$, que pueden escribirse $\underline{\tilde{C}} = \underline{C}^{-1}$, obtenemos

$$\underline{\theta} = \underline{\tilde{C}} \underline{\Phi} \quad (\text{IV.6})$$

Es interesante considerar esta ecuación cuando el límite es la superficie superior del cristal. La ecuación IV.6 se expresa entonces

$$\begin{pmatrix} \theta^{(1)} \\ \theta^{(2)} \\ \theta^{(3)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_0^{(1)} & C_1^{(1)} & C_n^{(1)} & \dots \\ C_0^{(2)} & C_1^{(2)} & C_n^{(2)} & \dots \\ C_0^{(3)} & C_1^{(3)} & C_n^{(3)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

y da como resultado $\theta^{(j)} = C_0^{(j)}$, tal como se había obtenido en el caso de dos haces.

Las amplitudes $\phi_j(t)$ en la superficie inferior del cristal pueden calcularse modificando la ecuación deducida oportunamente para el caso de dos haces, ec. II.29. Esta ecuación, para el caso de n haces excitados es

$$\phi_j(t) = \sum_{j=1,2,\dots,n} \theta^j C_j^{(j)} \exp 2\pi i \gamma^j t$$

que puede escribirse en forma matricial

$$\underline{\phi}(t) = \underline{C} \underline{E} \underline{\theta} \quad (\text{IV.6})$$

donde \underline{E} es una matriz de elementos diagonales

$$\exp 2\pi i \gamma^j t$$

y elementos no diagonales nulos. La relación anterior puede expresarse en términos de la matriz de difusión $\underline{S}(t)$, teniendo en cuenta que $\underline{\theta} = \underline{\tilde{C}} \underline{\phi}(0)$

$$\underline{\phi}(t) = \underline{S}(t) \underline{\phi}(0) \quad (\text{IV.7})$$

donde $\underline{S}(t) = \underline{C} \underline{E} \underline{C}^{-1}$. En la Figura IV.2 se muestran los perfiles de intensidad de las franjas de igual espesor, obtenidas por cálculo numérico de la ecuación IV.7.

Los parámetros usados en el cálculo corresponden aproximadamente a los del cobre, para un potencial de aceleración de 700 kV. Comparando

con los perfiles correspondientes al caso de dos haces, Figura II.9, se puede tener una idea de la importancia del efecto de varios haces para tensiones altas de aceleración.

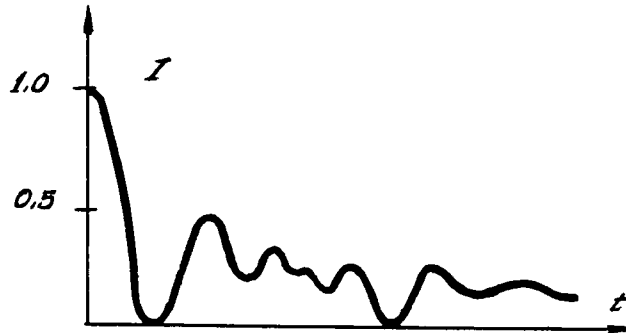


Figura IV.2

IV.2 El cristal imperfecto.

Para aplicar la teoría de varios haces al caso de un cristal imperfecto, lo único necesario es conocer la matriz de difusión $\underline{S}(z)$ para una lámina de cristal de espesor z desplazada en \vec{R} . La matriz $\underline{S}(z)$ se calcula rápidamente definiendo una matriz \underline{W} de la forma

$$\underline{W} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & \exp i\alpha_g & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \exp i\alpha_h & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

donde $\alpha_g = 2 \vec{g} \cdot \vec{R}$. En la porción de cristal desplazada, las matrices \underline{C} y \underline{C}^{-1} que aparecen en $\underline{S}(z)$ para el cristal no desplazado, se convierten en $\underline{W}^{-1} \underline{C}$ y $\underline{C}^{-1} \underline{W}$, respectivamente. Entonces, la matriz de difusión para la parte desplazada es

$$\underline{S}(z) = \underline{W}^{-1} \underline{C} \underline{E} \underline{C}^{-1} \underline{W}$$

Con este resultado es posible calcular las amplitudes $\phi_g(t)$ en la superficie de salida de un cristal imperfecto cuando en el mismo se excita un número arbitrario de haces.