

Посметьев Виктор Валерьевич

канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник
Центр прикладной математики
г. Воронеж, Воронежская область

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ДЭВИССОНА–ДЖЕРМЕРА МЕТОДОМ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

Аннотация: с помощью метода динамики частиц произведена оценка возможности воспроизвести опыт Дэвиссона–Джермера – отражение электронов от поверхности монокристалла – в рамках классической механики. Обнаружено количественное и качественное совпадение результатов моделирования с экспериментальными данными.

Ключевые слова: опыт Дэвиссона–Джермера, рассеяние электронов, монокристалл, метод динамики частиц, микрочастицы, волновые свойства, классическая механика.

Одним из первых подтверждений существования волновых свойств у микрочастиц считается эксперимент Дэвиссона–Джермера, в котором изучали отражение потока электронов от поверхности монокристалла никеля. Дэвиссон и Джермер в 1927 г. обнаружили, что зависимость интенсивности отраженного потока электронов от угла отражения является не плавной монотонной функцией, как можно было ожидать с точки зрения здравого смысла, а включает несколько выраженных пиков. Положение пиков на кривой рассеяния хорошо соответствует формуле Вульфа–Брэгга

$$\sin \theta_i = \frac{n_i \lambda}{2d_i}, \quad (1)$$

где i – номер пика на графике зависимости интенсивности отраженного потока от угла отражения θ_i ; d_i – межплоскостное расстояние; n_i – параметр кратности, λ – условная длина волны, которая в квантовой механике рассчитывается для микрочастицы, движущейся со скоростью v по формуле де Броиля $\lambda = h/(mv)$, где h – постоянная Планка, m – масса микрочастицы.

Считается, что опыт Дэвиссона–Джермера является блестящим подтверждением существования волновых свойств у микрочастиц и лежит в основе квантовой механики. Однако в последние десятилетия с развитием вычислительной техники и методов компьютерного моделирования оказалось, что многие явления, считавшиеся существенно квантово-механическими, хорошо моделируются с помощью классической механики: кооперативные явления в системе атомов [1], устойчивость кристаллических решеток [2], приближение переключающихся ионов для ковалентной связи [3] и др. В этой связи возник вопрос: можно ли, используя метод динамики частиц, получить немонотонную кривую рассеяния электронов при моделировании опыта Дэвиссона–Джермера. Поэтому в 2005 г. мы разработали компьютерную модель эффекта Дэвиссона–Джермера. В целом в работе использован обширный научный опыт (более 25 лет) воронежской школы физики твердого тела в моделировании атомной структуры и наноразмерных свойств металлов и диэлектриков в различном структурном состоянии.

Разработанная модель основана на методе динамики частиц (метод молекулярной динамики), в рамках которого воспроизводилось последовательное движение порядка 10^4 материальных точек-электронов и взаимодействие их с неподвижными материальными точками, представляющими атомы монокристалла (рисунок 1). Представленные в статье результаты получены в рамках двумерной модели (пространство XY). Силы, действующие на каждый электрон со стороны атомов условного монокристалла рассчитывались исходя из парного потенциала взаимодействия Борна–Майера [1, 4]:

$$U(r) = Ae^{-br}, \quad (2)$$

где U – энергия взаимодействия электрона и атома; r – расстояние между электроном и атомом; A и b – параметры взаимодействия электрона с атомом.

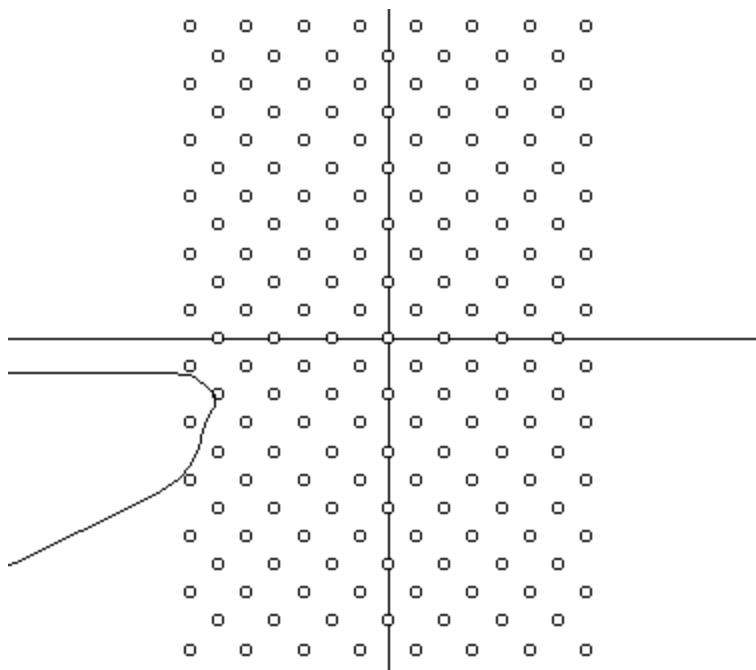


Рис. 1. Монокристаллическая решетка и траектория движения электрона в разработанной модели

В начальный момент времени электроны обладали одной и той же скоростью v . Для моделирования движения электронов использовали классическую динамику (второй закон Ньютона). Для получения траектории движения каждого электрона использовали численное интегрирование уравнений движения методом Рунге-Кутта второго порядка. Для реализации разработанного математического аппарата разработана компьютерная программа на языке Object Pascal в среде программирования Delphi 7 (рис. 2).

По мере движения 10^4 электронов накапливались статистические данные по углам отражения, и в результате получали кривые отражения (рис. 3). Обнаружено, что график отражения не является гладким и монотонным, а представляет собой наложение ярко выраженных пиков (рис. 3). Это является очень важным научным результатом, так как пики на графике рассеяния получены в рамках классической механики, и не связаны с волновыми свойствами электронов.

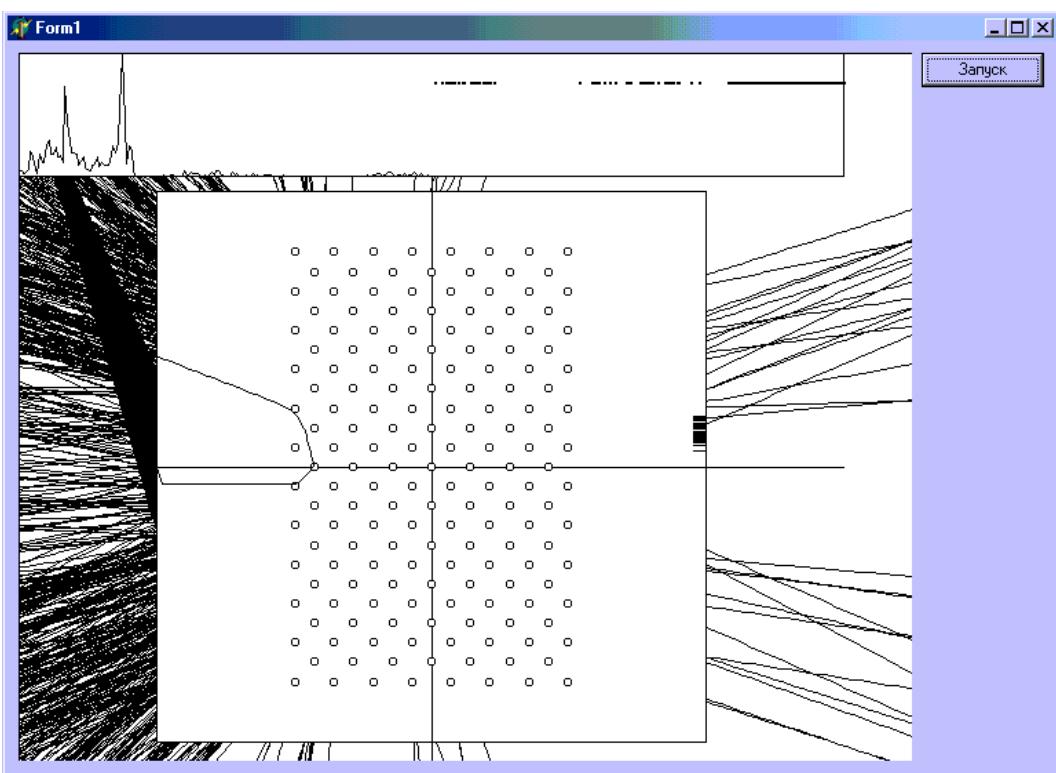


Рис. 2. Компьютерная программа для моделирования эффекта Дэвисона–Джермера. На заднем плане показаны траектории движения электронов

Вторым важным полученным результатом является зависимость положения θ_i пиков на графике $I(\theta)$ от начальной скорости электронов v . Проведена серия из 20 компьютерных экспериментов в которых варьировали начальную скорость электронов от 1 до 20 условных единиц, при этом длина волны де Бройля электронов в волновом приближении изменялась также в 20 раз). Обнаружено, что с увеличением начальной скорости v электронов (с уменьшением условной длины волны), картина пиков $I(\theta)$ смещается в сторону больших углов θ . Более того, отложив 20 точек, соответствующих каждому из основных пиков в координатах $(\sin \theta, 1/v)$ убедились, что точки хорошо описываются линейной зависимостью. Это свидетельствует о выполнении формулы Вульфа-Брэгга, что вообще сложно было ожидать от использовавшегося приближения классической механики, так как формула Вульфа-Брэгга обычно описывает явления дифракции существенно волновых объектов.

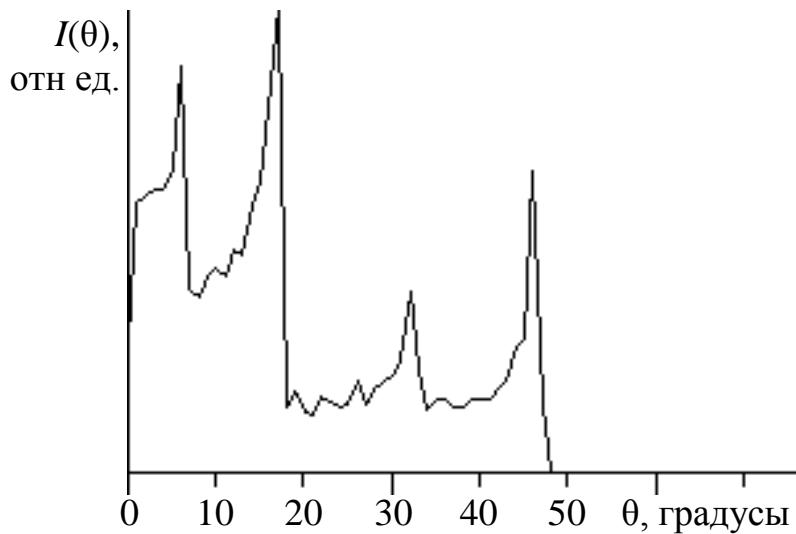


Рис. 3. Зависимость интенсивности I потока электронов от угла отражения θ , полученная с помощью модели

Объяснить квази-волновые свойства электронов, движущихся по законам классической динамики, можно на основе анализа траекторий электронов в потенциальном рельефе поверхности монокристалла (рис. 1, 2). Однако из-за ограниченного объема в данной статье не рассматривается большое количество полученных результатов: подробный анализ траекторий, моделирование в трехмерном пространстве, моделирование на поверхности поликристалла, рас- сеяния при сквозном проникновении потока электронов.

Чтобы повторить изложенные результаты достаточно владеть основами программирования на уровне студента вуза, потому автор надеется на привлечение широкого круга лиц для всестороннего изучения эффекта отражения электронов от монокристалла.

Таким образом, метод динамики частиц, основанный на классической ме- ханике, позволил получить линейчатый тип графика отражения электронов от поверхности монокристалла, а влияние скорости электронов в модели приводит к смещению пиков в соответствии с законом Вульфа-Брэгга. Это впервые объясняет природу квази-волнового поведения микрочастиц и позволяет болеешироко использовать методы классической механики в наноразмерной физике.

Список литературы

1. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела / В. Экштайн. – М.: Мир, 1995. – 319 с.
2. Посмельев В.В., Рентгенодифракционное исследование и компьютерное моделирование атомной структуры аморфных материалов / В.В. Посмельев, Ю.В. Бармин // Вестник ВГТУ: Сер. Материаловедение. – 2002. – Вып. 1.11. – С. 20–22.
3. Posmet'yev V.V. The Model of Random Close Packing of Charged Spheres / V.V. Posmet'yev, L.N. Korotkov, Yu.V. Barmin // The XXI International Conference on Relaxation Phenomena in Solids. – Voronezh, Russia, 2004. – P. 257.
4. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д.В. Хеерман. – М.: Наука, 1990. – 176 с.