≪연구논문≫ Journal of the Korean Magnetics Society, Volume 18, Number 1, February 2008

축약 각운동량 전개(Reduced Angular Momentum Expansion) 방법으로 해석한 전자 산란의 각 운동량 효과

강지훈*

국민대학교, 나노 전자 물리학과, 서울 성북구 정릉동 861-1, 136-701

(2008년 1월 15일 받음, 2008년 2월 1일 최종수정본 받음)

축약 각운동량 전개(Reduced Angular Momentum Expansion)을 사용하여 산란 진폭을 계산하였고, 평면파 근사와 비교하였다. Wentzel-Kramers-Brillouin(WKB) 방법을 써서 각 운동량이 영이 아닌 초기 파동의 곡률 효과를 주는 항이 광전자 또는 오제(Auger) 전자의 원심 퍼텐셜 에너지(centrifugal potential energy) 항이 됨을 보였으며, 이항은 평면파 근사에서 각 운동량에 의존하는 유효 파수 벡터가 됨을 보였다. 산란 진폭과 각 운동량과 관계를 구체적으로 보였다.

주제어 : 축약 각운동량 전개, 전자 산란, 전파인자, WKB 근사

I. 서 론

광전자 및 Auger 전자 산란은 고체 표면의 구조를 연구하는데 매우 중요한 방법이다. 특히 광전자 회절은 광전자 방출에 의한 전자가 주위 환경 즉 주위 원자들과의 결맞게(Coherent) 산란된 효과가 측정 장치에서 광전자 전류의 변화로 나타나는 현상이며, Auger 전자 회절 역시 Auger 방출된(Auger emission) 전자가 주위 원자들과의 산란된 효과가 광전자 회절의 경우처럼 관찰되는 현상을 말한다.

광전자 회절 실험결과를 표면구조 해석에 적용하기 위해서 이론적으로 정확히 계산하여야 한다. 가장 단순한 계산 방법은 방출전자 파동의 곡률효과를 무시한 평면파로 전개하는 것이다. 이 방법은 정성적으로 정확한 값을 주지만 정량적이지는 않다. 정량적인 값을 얻기 위해 다중산란(multiple-scattering) 효과 및 전자의 구면파 효과를 고려한 여러 근사 계산 방법이 제안되었다[1-3]. 그 중에서 축약 각운동량 전개의 경우 입사파를 평면파 대신에 구면파 (Y_{lm})로 취급하되, 자기 양자수가 $|m|\geq 2$인 구면조화함수는 영으로 놓고, 대신 Y_{lm}을 Y_{00}, Y_{10}, $Y_{1\pm1}$의 제한된 조화 함수 집합으로 전개한다[1]. 자기 양자수 계산을 단순화하여 계산 시간을 줄인다는 이점이 있는 방법이다. 본 논문에서는 Reduced Angular Momentum Expansion 을 사용하여, 산란 진폭을 계산하였고, 평면파 근사와 비교하였다. WKB 방법을 써서 각 운동량이 영이 아닌 초기 파동의 곡률 효과를 주는 항이 광전자 또는 Auger 전자의 centrifugal potential energy 항이 됨을 보였다. 이항은 평면파 근사에서 각 운동량에 의존하는 유효 파수 벡터가 됨을 보였다. 산란 진폭과 각 운동량과 관계를 구체적으로 보였다.

*Tel: (02) 910-1874, E-mail: spjk@kookmin.ac.kr

II. MSSCA (Modified Single Scattering Centre Approximation)

문제를 단순화하기 위하여, 이원자계를 고려하자. 한 원자는 광전자 또는 오제 전자를 방출한 원자인 emitter이며 다른 한 원자는 산란 원자인 scatterer이다. 이때 방출된 구면파 파동함수(입사파)와 산란된 구면파의 파동함수(산란파)는 구면 한켈 함수(spherical hankel function)과 구면조화함수의 곱으로 표현된다.

$$\psi = h_{l_1}(kr)Y_{L_1}(\hat{r}) + \sum_{L_2} h_{l_2}(k|r-a|)Y_{L_2}(\hat{\Omega}(r-a))T_{l_2}G_{L_2L_1}(a) \quad (1)$$

여기서,

$$G_{L_2L_1} = \sum_{L''} 4\pi i^{l_1 - l_2 + l''} h_{l''}(ka)Y^*_{L''}(\Omega(a)) \int d\Omega Y^*_{L_2} Y_{L_1} Y_{L''} \quad (2)$$

$$T_{l_2} = e^{i\delta_l} sin\delta_l \quad (3)$$

두 원자간의 거리는 a이다. 광전자와 Auger 전자 두 경우에서 산란진폭을 계산하기 위해서는 전파인자(Propagator) (2)를 계산하여야 하며, 평면파 근사(Plane wave approximation, PWA)가 평면파가 scatter로 입사한 반면, 전술한 축약 각운동량 함수 전개의 경우 임의의 Y_{lm}의 자기 양자수가 $|m|\geq 2$인 구면조화함수는 영으로 놓고, 주어진 축약 조화 각 운동량함수 집합(reduced angular momentum set)으로 전개한다. 두 원자를 잇는 축을 z축으로 잡으면, 축 주위에서 조화 함수는 다음과 같이 근사가 가능하고,

$$Y_{lm} \propto P_l^{|m|}(\cos\theta)\ (\sin\theta)^{|m|} \tag{4}$$

$|m| \geq 2$는 무시할 수 있다.

RAME로 표현된 조화함수는 다음과 같이 근사된다.

$$Y_{l0} \approx \left[1 - \frac{l(l+1)}{2}\right]\sqrt{(2l+1)}Y_{00} + \frac{l(l+1)}{2}\sqrt{\frac{(2l+1)}{3}}Y_{10},$$
$$Y_{l\pm1} \approx \sqrt{\frac{l(l+1)(2l+1)}{6}}Y_{1\pm1},$$
$$Y_{lm} \approx 0 \ \text{ for } |m| \geq 2 \tag{5}$$

전자-원자간의 산란에 있어 중요한 영역이 원자 퍼텐셜 값이 급격하게 변하는 곳, 즉 퍼텐셜 경계 영역이란 사실을 고려하면, 위의 RAME에서 사용된 조화 함수와 같은 각 운동량 값을 가지고 있는 구면 한켈 함수를 써서 경계 영역에서는 구면 파동함수 값을 사용하고, 다른 영역에서는 RAME를 써서 계산을 하게 되면, 정밀도를 높이고, 계산상의 복잡성을 피할 수 있다. RAME를 써서 표현한 구면파동함수는 다음과 같이 나타낼 수 있다[1].

$$\varphi_L = h_l(kr)Y_L \approx \left\{\frac{h_l(kR)}{h_0(kR)}\left[1 - \frac{l(1+1)}{2}\right]\sqrt{(2l+1)}\right\}h_0(kr)Y_{00}$$
$$+ \left\{\frac{h_l(kR)}{h_1(kR)}\frac{l(1+1)}{2}\sqrt{\frac{(2l+1)}{3}}\right\}h_1(kr)Y_{10}$$
$$+ \left\{\frac{h_l(kR)}{h_1(kR)}\sqrt{\frac{l(1+1)(2l+1)}{6}}\right\}h_1(Y_{11} + Y_{1-1}) \tag{6}$$

전파인자(Propagator)를 RAME를 써서 전개하되, 계산을 더욱 단순화 하기 위하여, 입사파 RAME를 등방 구면파 (isotropic spherical wave)만으로 전개한다[4].

$$\varphi_L = h_l(kr)Y_L \approx \frac{h_l(ka)Y_L}{h_0(ka)Y_{00}}h_0(kr)Y_{00} \tag{7}$$

주어진 조건에서 전파인자는 다음과 같이 주어진다.

$$G_{L_2L_1} \approx 4\pi(-1)^{l_2}\frac{h_{l_2}(kR)h_{l_1}(kR)}{h_0(kR)}Y^*_{L_2}Y_{L_1} \tag{8}$$

산란파는 다음과 같이 주어진다.

$$\psi_{sc} = e^{i\frac{l_1(l_1+1)}{2ka}}\left(\frac{e^{ika}}{ika}Y_{L_1}\right)$$
$$\left(\left\{\frac{4\pi}{ik}\sum_{L_2}(Y_{L_2}T_{l_2}Y^*_{L_2})\exp\left[i\frac{l_2(l_2+1)}{2ka} + i\frac{l_2(l_2+1)}{2kr}\right]\right\}\right)\frac{e^{ik|r-a|}}{|r-a|} \tag{9}$$

다음과 같이 변형하면,

$$\varphi(a)f_{eff}(\theta,a,|r-a|)\frac{e^{ik|r-a|}}{|r-a|},\ \varphi(r) = \left(\frac{e^{ikr}}{ikr}Y_{L_1}\right) \tag{10}$$

산란진폭 $f_{eff}(\theta,\ a,\ r)$은 다음과 같이 주어진다.

$$f_{eff}(\theta,a,r) = \exp\left[\frac{l_1(l_1+1)}{2ka}\right]$$
$$\left(\left\{\frac{4\pi}{ik}\sum_{L_2}(Y_{L_2}T_{l_2}Y^*_{L_2})\exp\left[i\frac{l_2(l_2+1)}{2ka} + i\frac{l_2(l_2+1)}{2kr}\right]\right\}\right) \tag{11}$$

이 과정에서 구면 한켈 함수는 다음의 전개식을 사용하였다[5].

$$h_l(kr) = i^{-l}\frac{e^{ikr}}{ikr}\left[1 + i\frac{l(l+1)}{2kr} + \cdots\right]\ i^{-l}\frac{e^{ikr}}{ikr}e^{i\frac{l(l+1)}{2kr}} \tag{12}$$

산란진폭은 원자간 거리 a와 측정위치 r이 충분히 큰 경우에는 평면파 근사의 산란진폭이 얻어지며, 다음과 같다[1].

$$f(\theta,a,r) = \frac{4\pi}{ik}\sum_{L_2}(Y_{L_2}T_{l_2}Y^*_{L_2}) = \frac{1}{ik}\sum_{l_2}(2l_2+1)P_{l_2}(\cos\theta)T_{l_2} \tag{13}$$

III. 입사파의 각 운동량 효과

평면파 근사 또는 small scattering atom approximation (SSCA)와 비교해 볼 때 함수 $\exp[i(l_1(l_1+1))/2ka]$ 만큼의 차이가 있다. 이 함수의 의미는 무엇인가? 입사파 각 운동량 정보를 가지고 있는 항이 삽입되었다.

(11), (12) 두식을 비교하면, 입사파와 산란파의 각 운동량과 에너지에 의존하는 함수 $\exp[i(l_1(l_1+1))/2ka]$, $\exp[i(l_2(l_2+1))/2ka]$ 함수의 차이가 있고, 나머지는 같다. 앞의 인자는 입사파의 각운동량 효과임이 다시 한번 확인된다. 이 인자는 에너지가 높은 경우에는 산란진폭에 기여를 하지 않지만, 에너지가 낮아질수록, 차이가 증가한다. 이러한 이유가 55 eV 영역의 전방산란에서 Auger 전자와 광전자에서 각각 dip과 peak가 발견된 이유이다[6, 7].

Barton[6]이 WKB 근사를 써서 각 운동량 있는 파동함수를 평면파로 표현할 수 있음을 보였는데 이를 적용하면, 입사파 각 운동량 효과 항은 입사파의 radial part는 다음과 같이 되고,

$$\frac{e^{i\int_{l+1/2}^{r=a}\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}dr}}{ika} \cong \frac{e^{i\left[ka + \frac{(l+1/2)^2}{2ka} - \frac{(l+1/2)\pi}{2}\right]}}{ika}$$
$$= C\frac{e^{ika\left[1 + \frac{(l+1/2)^2}{2(ka)^2}\right]}}{ika} \tag{14}$$

여기서 운동량을 포함하지 않은 양은 상수 C로 표현하였고, $l_1(l_1+1)$는 Langer correction $(l+1/2)^2$을 사용하였다[8, 9]. 유효 파수 벡터를 다음과 같이 정의하였다.

$$k_{eff} \approx k\left[1 + \frac{(1+1/2)^2}{2(ka)^2}\right] \qquad (15)$$

식 (14)을 보면, RAME에서 얻은 함수는 원천 파동의 각 운동량에 의한 원심 퍼텐셜 에너지 항임을 알 수 있다.

IV. 결 론

RAME근사를 이용하여 좀더 개선된 산란진폭을 구하고, 여기서 얻은 인자 $e^{i(l(l+1))/2ka}$를 WKB 방법을 써서 평면파와 유사한 형태로 보이면, RAME에서 얻은 인자는 입사파의 각 운동량에 의한 원심 퍼텐셜 에너지장벽(centrifugal potential barrier)에 의한 것임을 명확히 보였다. 아울러 산란진폭은 앞의 인자 외에도 산란파의 각 운동량에도 의존 항이 있음을 보았다.

감사의 글

본 연구는 2007년도 국민대학교 교내 연구비를 지원받아 수행된 연구입니다.

참고문헌

[1] V. Fritzsche and P. Rennert, Phys. Status Solidi (b), **135**, 49 (1986).
[2] J. J. Barton and D.A. Shirley, Phys. Rev. B, **32**, 1906 (1985).
[3] J. J. Rehr and E. A. Albers, Phys. Rev. B, **41**, 8139 (1990).
[4] Fritzsche and P. Rennert, Phys. Status Solidi (b), **142**, 15 (1987).
[5] H. C. Poon, D. Snider, and S. Y. Tong, Phys. Rev. B, **15**, 2198 (1986).
[6] V. Fritzsche and P. Rennert, Phys. Status Solidi (b), **147**, 485 (1990).
[7] V. Fritzsche and P. Rennert, Phys. Status Solidi (b), **142**, 49 (1987).
[8] John J. Barton and Louis J. Terminello, Phys. Rev. B, **46**, 13548 (1992).
[9] D. G. Frank, N. Batina, T. Golden, F. Lu, and A. T. Hubbard, Science, **247**, 182 (1990).
[10] R.E. Langer, Phys. Rev., **51**, 669 (1937).
[11] H. A. Bethe and R. Jackiw, Intermediate Quantum Mechanics 3rd ed. (Benjamin/Cummings, 1986), p 11.

Angular Momentum Effect of Electron Scattering with Reduced Angular Momentum Expansion

J.-H. Kang*
Department of Nano and Electronic Physics, Kookmin University, Seoul 136-791, Korea

(Received 15 January 2008, in final form 1 February 2008)

We calculate the electron scattering amplitude with reduced angular momentum expansion (RAME) and compare it with the plane wave approximation. By using WKB approximation it is shown that the curvature correction factor given by RAME is originated from the source wave centrifugal potential energy. The factor also can be understood as an effective wave number correction factor in plane wave approximation. Angular momentum and its relationship with scattering amplitude is explicitly shown.

Keywords : reduced angular momentum expansion, electron scattering, propagator, WKB approximation