

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



СЗ 26
М-747

10/6-76
P17 - 9530

1766/2-76

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

ДИФРАКЦИЯ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ
ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ
В МОДЕЛИ РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА. 1.

(Однократное рассеяние)

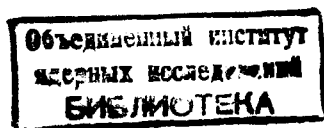
1976

P17 - 9530

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

ДИФРАКЦИЯ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ
ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ
В МОДЕЛИ РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА. 1.

(Однократное рассеяние)



Дифракция медленных электронов (ДМЭ) на поверхности твердых тел изучается экспериментально и теоретически уже около пятидесяти лет. Особенно резко возросло число экспериментальных работ по различным аспектам проблематики рассеяния электронов твердым телом в середине шестидесятых годов /1/, что обусловлено в первую очередь прогрессом в области вакуумной технологии и в методах получения чистой поверхности. Уже в первых экспериментах /2-6/ было отмечено значительное влияние на дифракционную картину адсорбции газов, и к настоящему времени ДМЭ позволила установить ряд существенных фактов, касающихся свойств адсорбата. Связано это с тем, что медленные электроны ($E_e \approx 10 \div n 10^2$ эВ, $n \approx 1-5$), обладая длиной волны, сравнимой с постоянными решетки, проникают вглубь твердого тела всего на несколько атомных слоев, что делает их уникальным инструментом изучения поверхностных явлений. Поскольку $E_e \geq 10$ эВ, то влияние колебаний решетки несущественно, хотя, как будет показано во второй части настоящей работы, их можно учесть обычным образом, добавляя к гамильтониану фононную часть и проводя те или иные аппроксимации при усреднении. Существеннее учесть влияния поверхностных плазмонов, чему посвящена третья часть данной работы. Здесь же мы будем полагать, что рассеиватели фиксированы в равновесных положениях, и что вклад плазмонов можно не учитывать. Таким образом, предметом настоящей работы явится детальное обсуждение ДМЭ при учете адсорбции. Некоторые результаты нашего подхода приведены в /8/. Адсорбцию будем рассматривать в модели решеточного газа с взаимодействием атомов, адсорбированных на ближайших соседних узлах

регулярной структуры /7/ *, одномерной (§2) или двумерной (§3). По этой проблеме, несмотря на ее безусловную теоретическую и практическую значимость, по существу нет теоретических исследований, - единственная публикация /9/ касается одномерных систем. Если учесть, однако, вышеупомянутые особенности ДМО и отсутствие сколько-нибудь удовлетворительной квантовомеханической теории адсорбции, можно попытаться обсудить данную проблему - некоторые результаты, полученные здесь, опубликованы нами в /8/ - в рамках простой квантостатистической модели адсорбции, предложенной и развитой в /7/. Единственный феноменологический параметр в данной модели константа эффективного взаимодействия адатомов, находящихся на ближайших соседних узлах, ξ ($\xi > 0$ - притяжение, $\xi < 0$ - отталкивание), определяемый из экспериментальных данных по теплотам адсорбции, позволяет вполне удовлетворительно описать всю совокупность данных для некоторых систем адсорбат-адсорбент. При этом развиваемый ниже подход не только полностью подтверждает высказанное в 1972 году одним из авторов (ВКФ) предположение о перво-степенной роли корреляционных эффектов в происхождении дополнительных пятен дифракционной картины рассеяния при адсорбции, но и позволяет оценить величину этих корреляций из экспериментов по ДМО.

§1. Общее выражение для сечения рассеяния электронов

Амплитуда рассеяния (Т-матрица) системы рассеивателей, потенциал которой можно представить как суперпозицию отдельных потенциалов:

* В терминологии физики поверхностных явлений атомы эти называются "адатомами".

$$V(\vec{r}) = \sum_f v(\vec{r} - \vec{R}_f), \quad (1)$$

f - номер узла, \vec{R}_f - координата f -го рассеивателя, дается выражением /10/:

$$T = \sum_f t_f + \sum_{f \neq f'} t_f G_o t_{f'} + \sum_{\substack{f \neq f' \\ f' \neq f''}} t_f G_o t_{f'} G_o t_{f''} + \dots, \quad (2)$$

где t_f - матрица амплитуды рассеяния на f -ом атоме, $G_o = (\epsilon_k - \epsilon_p + i\delta)^{-1}$, $\epsilon_p = p^2/2m$.

Интегральное уравнение для матрицы амплитуды рассеяния на отдельном рассеивателе $t(\vec{p}', \vec{p})$ имеет вид /11/

$$t(\vec{p}', \vec{p}) = v(\vec{p}', \vec{p}) + \int v(\vec{p}', \vec{p}'') G_o(\vec{p}, \vec{p}'') t(\vec{p}'', \vec{p}) d\vec{p}'', \quad (3)$$

т.е. всецело определяется видом фурье-компоненты потенциала рассеивателя $v(\vec{p}', \vec{p})$.

Дифференциальное сечение рассеяния дается выражением

$$d(\vec{n}, \vec{n}') \equiv \frac{d\Omega}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 \langle |T(\vec{p}', \vec{p})|^2 \rangle, \quad (4)$$

здесь $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение по состоянию, характеризующему "гамильтонианом адсорбции" (см. ниже). (В (4) и далее используется система единиц, в которой \hbar - постоянная Планка, деленная на 2π , равна единице). Связь между $T(\vec{p}', \vec{p})$ и $t(\vec{p}', \vec{p})$ легко устанавливается с помощью (2)

$$T(\vec{p}', \vec{p}) = \sum_f t_f(\vec{p}', \vec{p}) + \dots, \quad (5)$$

$$+ \sum_{f \neq f'} \int t_f(\vec{p}', \vec{p}'') G_o(\vec{p}, \vec{p}'') t_{f'}(\vec{p}'', \vec{p}) d\vec{p}'' + \dots,$$

$$t_f(\vec{p}; \vec{p}) \equiv t(\vec{p}; \vec{p}) \exp(-i\vec{q}\vec{R}_f), \quad \vec{q} = \vec{p}' - \vec{p}.$$

Используемая здесь t -матрица связана с используемой в "фазовом анализе" амплитудой $A(\vec{n}', \vec{n})$, $\vec{n}' = \vec{p}'/\rho'$, $\vec{n} = \vec{p}/\rho$ формулой

$$t(\vec{p}; \vec{p}) = -(2\pi)^{-2} m^{-1} A(\vec{n}', \vec{n}) = -\frac{1}{2ipm(2\pi)^2} \sum_e (2e+1)(e^{2i\delta_e} - 1) P_e(\vec{n}, \vec{n}'), \quad (6)$$

мы привели выражение для бесспиновых рассеивателей. При теоретическом обсуждении ДМЭ на чистых поверхностях широко эксплуатируется приближение изотропного рассеяния $\delta_e(p) = \delta(p) \delta_{e0}$. В этом случае

$$t(\vec{p}; \vec{p}) = -(2\pi)^{-2} (2ipm)^{-1} (\exp 2i\delta - 1) = -(2\pi)^{-2} (mp)^{-1} \sin \delta e^{i\delta}. \quad (7)$$

Ряд экспериментальных фактов по ДМЭ при адсорбции удается удовлетворительно объяснить, если воспользоваться результатами, полученными ниже и (7).

Следует отметить, что представление (7) t -матрицы через параметр δ -фазу S -волны не является, конечно, единственным возможным. Во многих случаях бывает удобно выразить t -матрицу через параметр a -длину рассеяния, введенную Ферми для вычисления дифференциальных сечений рассеяния медленных нейтронов на атомных системах [12]. Однако формальное приравнение дифференциального сечения рассеяния величине a^2

$$(2\pi)^4 m^2 |t(\vec{p}; \vec{p})|^2 = a^2 \quad (8)$$

в нашем случае дает неоднозначный результат ($a > 0$):

$$t(\vec{p}; \vec{p}) = -\frac{1}{(2\pi)^2 m} a (\sqrt{1 - p^2 a^2} \pm ipa). \quad (9)$$

Выбор знака в (9) можно осуществить введением, следуя Ферми [12], квазипотенциала

$$v(\vec{z}) = c \delta(\vec{z}). \quad (10)$$

При этом в случае рассеяния медленных электронов, для которых неприменимо борновское приближение, константу C нужно подобрать таким образом, чтобы весь ряд теории возмущений, получающийся итерацией уравнения (3), давал точный результат для сечения рассеяния электрона на отдельном атоме:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = a^2. \quad (11)$$

Подставляя (10) в (3) и решая уравнение (3) методом итерации, получим

$$t(\vec{p}; \vec{p}) = \frac{c}{(2\pi)^3} - \frac{c^2}{(2\pi)^6} I + \frac{c^3}{(2\pi)^9} I^2 - \dots, \quad (12)$$

$$I = -8\pi m \int_0^\infty \frac{p'^2 dp'}{p^2 - p'^2 + i\delta}. \quad (13)$$

Интеграл (13) расходится. Но ряд теории возмущений, строго говоря, не имеет смысла, если все члены ряда, начиная со второго, бесконечны. Чтобы сохранить смысл квазипотенциала Ферми, успешно применявшегося для описания рассеяния медленных нейтронов на атомных системах [12, 13], необходимо ввести гра-

ничный виртуальный импульс L и соответствующим образом перенормировать константу C в (10) /I4/.

Имеем

$$I = -8\pi m \int_0^L \frac{p'^2 dp'}{p'^2 - p'^2 + i\delta} = \\ = 8\pi m \left(L + \frac{1}{2} p \ln \frac{L-p}{L+p} + \frac{1}{2} i\pi p \right). \quad (14)$$

Потребовав далее, чтобы выполнялось неравенство

$$\left| \frac{C}{(2\pi)^3 I} \right| < 1, \quad (15)$$

из (12) получим выражение для матрицы амплитуды рассеяния

$$t(\vec{p}; \vec{p}) = \frac{C/(2\pi)^3}{1 + C I/(2\pi)^3}. \quad (16)$$

Из уравнения (11), используя (14), (16) и (4), можно найти константу C

$$C = \frac{-(L + \frac{1}{2} p \ln \frac{L-p}{L+p}) \pm \frac{\pi}{2\alpha} \sqrt{1-p^2\alpha^2}}{\frac{m}{\pi^2} \left[(L + \frac{1}{2} p \ln \frac{L-p}{L+p})^2 + \frac{\pi^2 p^2}{4} - \frac{\pi^2}{4\alpha^2} \right]}.$$

Выбирая из условия (15) знак плюс в числителе и производя сокращение, получим окончательно

$$C = -\frac{\pi^2}{m} \frac{1}{L + \frac{1}{2} p \ln \frac{L-p}{L+p} + \frac{\pi}{2\alpha} \sqrt{1-p^2\alpha^2}}. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (10), найдем выражение для квазиотенциала

$$V(\vec{r}) = -\frac{\pi^2}{m} \frac{1}{L + \frac{1}{2} p \ln \frac{L-p}{L+p} + \frac{\pi}{2\alpha} \sqrt{1-p^2\alpha^2}} \delta(\vec{r}), \quad (18)$$

которым можно пользоваться для расчета сечения изотропного рассеяния медленного электрона на отдельном атоме по теории возмущений.

Как видно из (18), $V(\vec{r})$ имеет смысл только при $pa \leq 1$. Учитывая, что знак равенства исключается условием (15), приходим к строгому неравенству

$$pa < 1, \quad (19)$$

выражающему условие применимости теории возмущений для описания рассеяния медленных электронов. Условие (19), как и следовало ожидать, является более слабым, чем условие применимости борновского приближения $pa \ll 1$.

Выбор знака плюс в выражении для константы C соответствует, очевидно, выбору знака плюс и в представлении для t -матрицы (9):

$$t(\vec{p}; \vec{p}) = -\frac{1}{(2\pi)^2 m} \alpha (\sqrt{1-p^2\alpha^2} + ip\alpha). \quad (20)$$

Такой выбор стал возможен благодаря отбору расходящихся волн ($\delta \rightarrow +0$ в (13)) /II/.

В дальнейшем мы будем использовать оба представления для t -матрицы изотропного рассеяния (7) и (20), исходя исключительно из удобства вычислений.

Подставляя (20) в (5) и вводя обозначение

$$c_f \equiv \alpha_f (\sqrt{1 - \rho^2} a_f^* + i \rho \alpha_f), \quad (21)$$

найдем

$$T(\vec{p}; \vec{p}) = -\frac{1}{(2\pi)^2 m} \sum_f c_f e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} + \frac{1}{(2\pi)^4 m^2} \sum_{f \neq f'} c_f c_{f'} e^{-i(\vec{p}\vec{R}_f - \vec{p}\vec{R}_{f'})} \int e^{i\vec{p}''(\vec{R}_f - \vec{R}_{f'})} \frac{d^3 p''}{\varepsilon - \varepsilon'' + i\delta} + \dots \quad (22)$$

Или, заменяя интеграл в (22) его известным значением [15]:

$$T(\vec{p}; \vec{p}) = -\frac{1}{(2\pi)^2 m} \sum_f c_f e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} - \frac{1}{(2\pi)^2 m} \sum_{f \neq f'} c_f c_{f'} e^{-i(\vec{p}\vec{R}_f - \vec{p}\vec{R}_{f'})} \frac{e^{i\rho|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|} + \dots \quad (23)$$

Подставив (23) в (4), для дифференциального сечения изотропного рассеяния медленных электронов на атомной системе получим окончательно [6]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{f, f'} \langle c_f c_{f'}^* \rangle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_f - \vec{R}_{f'})} + \sum_{f, f' \neq f''} \langle c_f c_{f'}^* c_{f''}^* \rangle e^{-i\vec{q}\vec{R}_f + i(\vec{p}\vec{R}_f - \vec{p}\vec{R}_{f'})} \frac{e^{-i\rho|\vec{R}_f - \vec{R}_{f''}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f''}|} + \dots \quad (24)$$

$$+ \sum_{f \neq f', f''} \langle c_f c_{f'} c_{f''}^* \rangle e^{i\vec{q}\vec{R}_f - i(\vec{p}\vec{R}_f - \vec{p}\vec{R}_{f'})} \frac{e^{i\rho|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|} + \dots$$

§2. Дифракция на одномерных цепочках (полимерах)

Будем считать, что ДЭ происходит на регулярной структуре размерности d ($d=1, 2$), N_α узлов которой заняты адатомами, $(N - N_\alpha)$ узлов обладают свойствами чистой поверхности χ . В таком случае

$$t_f = \alpha n_f + \beta(1 - n_f), \quad n_f = 0, 1, \quad (25)$$

α, β суть функции ρ, \vec{n}, \vec{n}' вида (7) или (20) и являются t -матрицами занятого и свободного узла, соответственно. Гамильтониан адсорбции дается выражением [7]

$$H = -\gamma \sum_f n_f - \frac{\varepsilon}{2} \sum_{f_1 \neq f_2} n_{f_1} n_{f_2}. \quad (26)$$

γ есть функция температуры, давления и "внутренних свойств" адатомов, ε - эффективное взаимодействие; суммирование в (26) ведется по узлам решетки в первом слагаемом и по всем парам ближайших соседей во втором слагаемом. Каждый узел имеет Z ближайших соседей. Подставляя (25) в первый член (24), то есть пренебрегая многократным рассеянием, и учитывая трансляционную инвариантность, получаем

$$\delta_1(\vec{n}, \vec{n}') = AN \sum_f e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} + BN \sum_f \langle n_f n_{f'} \rangle e^{-i\vec{q}\vec{R}_f}, \quad (27)$$

$$A = (2\pi)^d m^2 [|\rho|^2 + (\alpha\beta^* + \alpha^*\beta)\theta],$$

$$B = (2\pi)^d m^2 [1 - \alpha^2 - \alpha^*\beta - \alpha\beta^* + |\rho|^2], \quad \theta = \langle n_f \rangle.$$

χ Отношение $N_\alpha/N = \theta$ ($0 \leq \theta \leq 1$) по терминологии, сложившейся в области поверхностных явлений, называется "окрытием".

Первый член, если учесть, что $\sum_f \exp(-i\vec{q}\vec{R}_f) \doteq N\Delta_{\vec{q}_n, \vec{q}}$, \vec{q} - вектор обратной решетки, \vec{q}_n - проекция \vec{q} на линию и плоскость, соответственно, описывает обычную Фраунгоферову дифракцию; второй член всецело определяется изменением дифракционной картины, обусловленным адсорбцией. Чтобы проанализировать его вклад, необходимо располагать выражением для парного коррелятора $\langle n_o n_f \rangle$. Сразу же подчеркнем, что пренебрежение корреляционными эффектами ($\langle n_o n_f \rangle \rightarrow \langle n_o \rangle \langle n_f \rangle = \theta^2$) автоматически приводит к выводу, что адсорбция не влияет на геометрический вид дифракционной картины, а влияет лишь на интенсивность пятен. Это находится в резком противоречии с экспериментом. Для одномерной системы ($d=1$, $z=2$) используем точные формулы для $\langle n_o n_k \rangle$, $k=0, 1, \dots$, [16, 17]

$$\langle n_o \rangle = \langle n_f \rangle = x_1 \equiv \theta = \frac{1-nz}{2},$$

$$\langle n_o n_1 \rangle = \langle n_o n_{-1} \rangle = x_2 = \frac{N_1}{2(N_o - N_1)} [N_o - 1 + (N_o + n)z], \quad (28)$$

$$\langle n_o n_2 \rangle = \langle n_o n_{-2} \rangle = x_3 = \frac{N_o - 2N_1 N_o + N_1^2}{2(N_o - N_2)^2} [1 - (2N_o + n)z],$$

$$\langle n_o n_k \rangle = \langle n_o n_{-k} \rangle = x_k^2 + (x_3 - x_1^2) \lambda^{k-2}, \quad k \geq 3.$$

Через n , z , λ N_m в (28) обозначены следующие величины:

$$n = 1 - 2N_1, \quad z = \left[\frac{1 - N_o}{n^2 + N_o(3 - 4N_1)} \right]^{1/2}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{p^2 - 4} - p}{2}, \quad (29)$$

$$p = \frac{1}{N_o - N_1} \left[1 + \frac{N_1(N_o - 2N_1 + N_1^2)}{N_1 - N_2} \right], \quad N_m = \frac{1}{e^{\beta(\mu - m\epsilon)} + 1}.$$

Подстановка (28) в (27) даст [8/

$$d(\vec{n}', \vec{n}) = 2\pi(A + Bx_1^2)N\delta(\phi) + BNx_1(1 - \epsilon_2) + 2BN[(1-\lambda)x_1^2 + \lambda x_2 - x_3] \frac{\cos \phi}{\lambda} + 2BN(x_3 - x_1^2) \frac{\cos \phi - \lambda}{\lambda(1 - 2\lambda \cos \phi + \lambda^2)}, \quad (30)$$

$\phi = d\vec{q}\vec{j}$, d - расстояние между узлами, \vec{j} - единичный вектор, направленный вдоль цепочки узлов.

Отсюда для малых покрытий θ , используя (28) и (29), пренебрегая членами порядка θ^3 находим

$$d(\vec{n}', \vec{n}) \simeq 2\pi(A + B\theta^2)N\delta(\phi) + BN\theta(1 - \epsilon) - 2BN\theta^2(1 - \epsilon^k) \cos \phi. \quad (31)$$

Так как δ -функция здесь имеет период 2π , то первый член в правой части (31) соответствует наличию на дифракционной картине обычных брэгговских максимумов, определяемых условием $\phi = 2\pi n$, n - целое, которые имеются и в случае дифракции на чистой цепочке, то есть при $B=0$. Кроме того, как видно из (31), наличие адсорбированного газа приводит к появлению дополнительных максимумов при $\phi = 2\pi(n + \frac{1}{2})$. Формулы (30) и (31) могут быть использованы в задачах о дифракции квазиодномерными системами (полимерами).

§3. Дифракция на двумерных решетках

Обращаясь к случаю двумерной квадратной решетки, удобно ввести $\phi = \vec{q}\vec{j}d$, $\phi' = \vec{q}'\vec{j}'d$, где d - постоянная

решетки, \vec{j}, \vec{j}' - орты декартовой прямоугольной системы координат, и воспользоваться для $\langle n_x, n_y \rangle$ одной из аппроксимаций, в которой учитываются корреляционные эффекты /17, 18/. В "полиномиальном расщеплении" /17, 18/ имеем

$$\begin{aligned} d_1(\vec{n}; \vec{n}) &= 4\pi^2 (A + B\theta^2) N \delta(\phi) \delta(\phi') + BN\theta(1-\theta) - \\ &- 2BN(\theta^2 - f_2)(\cos\phi + \cos\phi'), \end{aligned} \quad (32)$$

$$f_2 = \langle n_x, n_y \rangle = \frac{1}{4} \sum_{\kappa}^4 \kappa C_{\kappa}^k \frac{\theta^{\kappa} (1-\theta)^{4-\kappa}}{1 + \exp(-\beta v - \beta \epsilon \kappa)}.$$

В "суперпозиционном приближении" /17, 18/ получаем /8/

$$\begin{aligned} d_1(\vec{n}; \vec{n}) &= 4\pi^2 (A + B\theta^2) N \delta(\phi) \delta(\phi') + \\ &+ BN\theta(1-\theta) \frac{(1-\lambda^2)^2}{(1-2\lambda\cos\phi + \lambda^2)(1-2\lambda\cos\phi' + \lambda^2)}. \end{aligned} \quad (33)$$

При малых покрытиях ($\theta \leq \frac{1}{2}$) (32), (33) приводят к результату:

$$\begin{aligned} d_1(\vec{n}; \vec{n}) &\approx 4\pi^2 (A + B\theta^2) N \delta(\phi) \delta(\phi') + BN\theta(1-\theta) - \\ &- 2BN\theta^2(1 - e^{\beta\epsilon})(\cos\phi + \cos\phi'). \end{aligned} \quad (34)$$

Для двумерной треугольной решетки ($Z=6$) с точностью до θ^2 выражение для d_1 можно получить, если воспользоваться результатами /17/

$$\begin{aligned} d_1(\vec{n}; \vec{n}) &\approx 4\pi^2 (A + B\theta^2) N \delta(\phi) \delta(\phi') + BN\theta(1-\theta) - \\ &- 2BN\theta^2(1 - e^{\beta\epsilon}) [\cos\phi + \cos\phi' + \cos(\phi - \phi')], \end{aligned} \quad (35)$$

где $\phi = \vec{q}\vec{j}d$, $\phi' = \vec{q}\vec{j}'d$, но \vec{j} и \vec{j}' - орты косоугольной системы координат с углом между осями равным $\pi/3$. Основной особенностью выражений (32)-(35) является наличие дополнительных членов, связанных с адсорбцией и обусловленных корреляционными эффектами. Если первые слагаемые описывают обычные брэгговские максимумы, имеющие в координатах $[(\phi/2\pi), (\phi'/2\pi)]$ индексы (m, n) , то при адсорбции возможно возникновение дополнительных пятен с координатами $(m+1/2, n+1/2)$ для (32)-(34) и двух дополнительных пятен с координатами $(m+1/3, n+2/3)$, $(m+2/3, n+1/3)$ для (35). Если воспользоваться правилом, предложенным в работе /19/, можно установить, что для систем, в которых существенно взаимодействие лишь ближайших соседей, на квадратной решетке образуется структура $C(2 \times 2)$, а на треугольной - структура (3×1) . Первая структура образуется, например, при адсорбции H на W (100) /20/, N на W (100) /21/, CO на Ni (100) /22/ Bi на Cu (100) /23/. Вторая структура наблюдалась, например, при адсорбции O на Nb (110) /24/.

Используя выражения для дифференциального сечения рассеяния (33) и (35), можно указать способ экспериментального определения константы взаимодействия ϵ для двух рассмотренных типов решеток. В самом деле, зная в относительных единицах интенсивности M_1 и M_2 одного из дополнительных пятен при температурах T_1 и T_2 соответственно, можно определить ϵ из уравнений

$$\epsilon = - \frac{\ln \frac{M_1}{M_2}}{\beta_1 - \beta_2}, \quad (36)$$

$$3 \left(\frac{M_1}{M_2} e^{\beta_2 \epsilon} - e^{\beta_1 \epsilon} \right) = 5 \left(\frac{M_1}{M_2} - 1 \right). \quad (37)$$

При получении (36) и (37) из (33) и (35) мы воспользовались тем, что для структуры $C(2 \times 2)$ покрытие $\theta = 1/2$, а для $\theta = 1/3$. При этом, чтобы при изменении температуры сохранить покрытие постоянным, необходимо, разумеется, соответствующим образом менять давление.

Зависимость интенсивности дополнительных пятен от температуры при адсорбции на квадратной решетке, даваемая уравнением (36), хорошо согласуется с экспериментальными данными работы [23] по измерению температурной зависимости интенсивности пятна (1/2, 1/2) при адсорбции V_i на $Cu(100)$.

Литература

1. E. G. Davison. Progress in Surface Science, Ed., v.1, 1972.
2. E. Davison, L.H. Germer. Phys.Rev., 30, 705, 1927.
3. L.H. Germer. Phys., 54, 408, 1929.
4. E. Kupp. Z.Elektrochem., 35, 586, 1929.
5. E. Kupp. Ann.Phys., 2, 453, 1930.
6. Г.Марк, Р.Вирль. Дифракция электронов, ГТТИ, 1933.
7. В.К.Федянин. ЖФХ, 44, 495, 1970; 45, 2867, 1971; 46, 119, 1972; Тр. I Всесоюзной конференции по поверхностным явлениям, ЛГУ, 1972, стр.27.
8. А.Е.Мозольков, В.К.Федянин. ДАН СССР, 219, 393, 1974.
9. E. G. Carrol. Surface Sci., 22, 11, 1972.
10. Р.Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц, М., Мир, 1969.
11. С.Фудзита. Введение в неравновесную квантовую статистическую механику, М., Мир, 1969.

12. E.Fermi. Ricerca Scientifica, 7, 13, 1936.
13. L.Van Hove. Phys.Rev., 95, 249, 1954.
14. Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков. Введение в теорию квантованных полей, М., Наука, 1973.
15. Г.Ф.Друкарев. Теория столкновений электронов с атомами, М., Физгиз, 1963.
16. С.В.Тябликов, В.К.Федянин. Физ.мет. и металловед., 23, 2, 1967.
17. В.К.Федянин. В сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля," под ред. Н.Н.Боголюбова, М., Наука, 1973.
18. В.К.Федянин. Международный конгресс по магнетизму, М., 1974, стр. 148.
19. R.L.Park, H.H.Madden, Jr.Surface Sci., 11, 188, 1968.
20. P.J.Estrup, J.Anderson. J.ChemPhys., 45, 2254, 1966.
21. P.J.Estrup, J.Anderson. J.Chem., 46, 567, 1967.
22. M.Oncli, H.E.Farnsworth. Surface Sci., 11, 203, 1968.
23. F.Delamare, G.E.Rhead. Surface Sci., 35, 172, 1973.
24. T.W.Naas, A.G.Jackson, M.P.Hooker. J.Chem.Phys., 46, 3025, 1967.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 февраля 1976 года.