

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



С326

10/1-76

М-747

P17 - 9531

1767/2-76

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

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

(Двукратное рассеяние. Фононы)

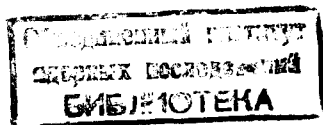
1976

P17 - 9531

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

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

(Двукратное рассеяние. Фононы)



В работах /1,2/ при анализе сечения рассеяния медленных электронов мы пренебрегали вкладом процессов двукратного рассеяния, а также рассеянием более высокого порядка. Это соответствовало тому, что в разложении дифференциального сечения по корреляционным функциям

$$\begin{aligned}
 \sigma(\vec{n}, \vec{n}) = & \sum_{j, j'} \langle c_j c_{j'}^* \rangle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'})} + \\
 & + \sum_{j, j', j''} \langle c_j c_{j'}^* c_{j''}^* \rangle e^{-i\vec{q}\vec{R}_j + i(\vec{p}'\vec{R}_{j'} - \vec{p}\vec{R}_{j''})} \frac{e^{-i|\vec{p}|\vec{R}_{j'} - \vec{R}_{j''}|}}{|\vec{R}_{j'} - \vec{R}_{j''}|} + \\
 & + \sum_{j, j', j''} \langle c_j c_{j'} c_{j''}^* \rangle e^{i\vec{q}\vec{R}_{j''} - i(\vec{p}'\vec{R}_j - \vec{p}\vec{R}_{j'})} \frac{e^{i|\vec{p}|\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}|}}{|\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}|} + \dots
 \end{aligned} \quad (I)$$

составлялся лишь первый член. Уже в таком приближении удалось объяснить основное изменение, происходящее в дифракционных картинах при попадании газа на чистую поверхность металла: появление дополнительных пятен, не укладывающихся в простую номенклатуру Брэгга. Однако, без учета двукратного рассеяния оказалось невозможным понять зависимость интенсивности дифракционных максимумов от энергии электронов, наблюдавшуюся в многочисленных экспериментах /3/. Кроме того, существование более сложных, по сравнению с описанными в /1,2/ дифракционных картин, видимо, также можно объяснить процессами многократного рассеяния.

§1. Двукратное рассеяние

Рассмотрим сечение рассеяния медленных электронов квадратной решеткой с учетом второй суммы в разложении (1).

При этом для простоты ограничимся разложением до θ^2 включительно по покрытию θ (оно учитывает эффекты корреляции), а также будем считать, что исходный пучок электронов падает нормально к поверхности, т.е. $d\vec{q}_1 = d\vec{p}'_1 = \phi$, $d\vec{q}_2 =$

$= d\vec{p}'_2 = \phi'$, $d\vec{p}_1 = d\vec{p}'_1 = 0$. Тогда после несложных, но громоздких вычислений (1) примет вид

$$\begin{aligned} \delta(\vec{n}; \vec{n}') &= 4\pi^2 (A + B\theta^2) \delta(\phi) \delta(\phi') + VN\theta(1-\theta) - \\ &- 2BN\theta^2(1-e^{\beta\epsilon})(\cos\phi + \cos\phi') + \\ &+ 4\pi^2 \frac{1}{d} [(2cI_0 + 2c^*I_0^* + 2I_0 + 2I_0^*)\theta^2 + \\ &+ (EI_0 + E^*I_0^*)\theta + FI_0 + F^*I_0^*] N \delta(\phi) \delta(\phi') - \\ &- 16\pi^2 \frac{1}{d} (2e^{ipd} + 2e^{-ipd}) N\theta^2(1-e^{\beta\epsilon}) \delta(\phi) \delta(\phi') + \\ &+ \frac{1}{d} [c(I_0 + I) + c^*(I_0^* + I^*)] N\theta(1-\theta) + \\ &+ \frac{1}{d} [G(I_0 + I) + G^*(I_0^* + I^*)] N\theta^2 - \\ &- \frac{1}{d} (Ge^{ipd} + G^*e^{-ipd}) N\theta^2(1-e^{\beta\epsilon}) - \\ &- \frac{2}{d} (Ge^{ipd} + G^*e^{-ipd}) N\theta^2(1-e^{\beta\epsilon})(\cos\phi + \cos\phi') - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} - \frac{2}{d} [c(I_0 + I) + c^*(I_0^* + I^*)] N\theta^2(1-e^{\beta\epsilon})(\cos\phi + \cos\phi'), \\ c = \gamma|\alpha - \gamma|^2, \mathcal{D} = \gamma^*(\alpha - \gamma)^2, E = \gamma^2(\alpha^* - \gamma^*) + 2|\gamma|^2(\alpha - \gamma), \\ F = \gamma|\gamma|^2, G = (\alpha - \gamma)|\alpha - \gamma|^2, \alpha = a(\sqrt{1 - p^2 a^2} + ipa), \\ \gamma = \theta(\sqrt{1 - p^2 \theta^2} + ip\theta), \end{aligned}$$

$$I_0 = \sum_{\substack{\kappa, \kappa' \\ (\kappa^2 + \kappa'^2 > 0)}} \frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2}},$$

$$I = \sum_{\substack{\kappa, \kappa' \\ (\kappa^2 + \kappa'^2 > 0)}} e^{-i(\kappa\phi + \kappa'\phi')} \frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2}}.$$

Следуя работам /4, 5/, преобразуем суммы (3) и (4) к виду, удобному для дальнейшего анализа. Поскольку $I_0 =$
 $= I|_{\phi = \phi' = 0}$, достаточно рассмотреть лишь сумму (4), введем в эту сумму малый параметр z ($z \rightarrow 0$)

$$I(z) = \sum_{\substack{\kappa, \kappa' \\ (\kappa^2 + \kappa'^2 > 0)}} e^{-i(\kappa\phi + \kappa'\phi')} \frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2}}}{\sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2}}. \quad (5)$$

Тогда, очевидно, $I = I(0)$. Далее воспользуемся интегральным представлением /4, 5/

$$\begin{aligned} \frac{\exp(ipdR)}{R} &= \lim_{\substack{p \rightarrow 0 \\ \alpha \rightarrow \frac{\pi}{4}}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(\frac{p^2 d^2}{4\epsilon^2} - R^2 \epsilon^2\right) d\epsilon \equiv \\ &\equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} \exp\left(\frac{p^2 d^2}{4\epsilon^2} - R^2 \epsilon^2\right) d\epsilon, \end{aligned} \quad (6)$$

где $R = \sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2}$. Тогда, учитывая, что

$$\int_{(0)}^{\infty} \dots d\varepsilon = \int_E^{\infty} \dots d\varepsilon + \int_{(0)}^E \dots d\varepsilon,$$

(5) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} I(z) = & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_E^{\infty} \sum_{\substack{\kappa, \kappa' \\ (\kappa^2 + \kappa'^2 > 0)}} \exp\left[\frac{p^2 d^2}{4\varepsilon^2} - R^2 \varepsilon^2 - i(\kappa\phi + \kappa'\phi')\right] d\varepsilon + \\ & + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^E \sum_{\kappa, \kappa'} \exp\left[\frac{p^2 d^2}{4\varepsilon^2} - R^2 \varepsilon^2 - i(\kappa\phi + \kappa'\phi')\right] d\varepsilon - \\ & - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^E \exp\left(\frac{p^2 d^2}{4\varepsilon^2} - z^2 \varepsilon^2\right) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (7)$$

Первый интеграл в (7) хорошо известен (см., например, /5/):

$$\begin{aligned} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_E^{\infty} \exp\left(\frac{p^2 d^2}{4\varepsilon^2} - R^2 \varepsilon^2\right) d\varepsilon = & \frac{1}{2R} \left[\exp(ipdR) \operatorname{erfc}\left(\frac{ipd}{2E} + RE\right) + \right. \\ & \left. + \exp(-ipdR) \operatorname{erfc}\left(-\frac{ipd}{2E} + RE\right) \right], \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

Прежде чем вычислять второй интеграл, в (7) преобразуем сумму, стоящую под знаком этого интеграла, с помощью тождества /4-6/:

$$\sum_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} \exp(-\pi\varepsilon^2\tau - i2\pi\varepsilon\theta) = \tau^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\pi\theta^2}{\tau}\right) \sum_{\varepsilon=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon^2}{\tau} - \frac{2\pi\varepsilon\theta}{\tau}\right),$$

которое может быть доказано применением формулы суммирования Пуассона /7/. Тогда получим:

$$\sum_{\kappa, \kappa'} \exp\left[\frac{p^2 d^2}{4\varepsilon^2} - R^2 \varepsilon^2 - i(\kappa\phi + \kappa'\phi')\right] = \frac{\pi}{\varepsilon^2} \sum_{n, n'} \exp\left(\frac{\mathcal{X}_n^2}{4\varepsilon^2} - z^2 \varepsilon^2\right),$$

где

$$\mathcal{X}_n^2 = p^2 d^2 - (\phi + 2\pi n)^2 - (\phi' + 2\pi n')^2. \quad (9)$$

Теперь второй интеграл в (7) может быть вычислен /5/ с помощью (8) и равенства

$$\varepsilon^{-2} = \int_0^{\infty} \exp(-\varepsilon^2 t) dt.$$

В результате получим:

$$\begin{aligned} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^E \exp\left(\frac{\mathcal{X}_n^2}{4\varepsilon^2} - z^2 \varepsilon^2\right) \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^2} = & \frac{i}{\mathcal{X}_n} \left[\exp(i\mathcal{X}_n |z|) \operatorname{erfc}\left(-\frac{i\mathcal{X}_n}{2E} - |z|E\right) + \right. \\ & \left. + \exp(-i\mathcal{X}_n |z|) \operatorname{erfc}\left(-\frac{i\mathcal{X}_n}{2E} + |z|E\right) \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Последний интеграл в (7) преобразуется с помощью (6) и (8)

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^E \exp\left(\frac{p^2 d^2}{4\varepsilon^2} - z^2 \varepsilon^2\right) d\varepsilon = \frac{\exp(ipd|z|)}{|z|} - \quad (11)$$

$$- \frac{1}{2|z|} \left[\exp(ipd|z|) \operatorname{erfc}\left(\frac{ipd}{2E} + |z|E\right) + \exp(-ipd|z|) \operatorname{erfc}\left(-\frac{ipd}{2E} + |z|E\right) \right].$$

Подставляя (8), (10) и (11) в (7), получим окончательно:

$$I(z) = \sum_{\substack{\kappa, \kappa' \\ (\kappa^2 + \kappa'^2 > 0)}} \frac{\exp[-i(\kappa\phi + \kappa'\phi')]}{2(\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot \left\{ \exp[ipd(\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2)] \cdot \right.$$

$$\operatorname{erfc}\left[\frac{ipd}{2E} + (\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} E\right] + \exp[-ipd(\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}]. \quad (12)$$

$$\operatorname{erfc}\left[-\frac{ipd}{2E} + (\kappa^2 + \kappa'^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} E\right] + i\pi \sum_{n, n'} \frac{1}{\mathcal{K}_n}.$$

$$\begin{aligned} & \left[\exp(i\mathcal{K}_n |z|) \operatorname{erfc}\left(-\frac{i\mathcal{K}_n}{2E} - |z| E\right) + \exp(i\mathcal{K}_n |z|) \operatorname{erfc}\left(-\frac{i\mathcal{K}_n}{2E} + \right. \right. \\ & \left. \left. + |z| E\right) \right] - \frac{1}{|z|} \left[\exp(ipd|z|) - \frac{1}{2} \exp(ipd|z|) \operatorname{erfc}\left(\frac{ipd}{2E} + \right. \right. \\ & \left. \left. + |z| E\right) - \frac{1}{2} \exp(-ipd|z|) \operatorname{erfc}\left(-\frac{ipd}{2E} + |z| E\right) \right], \end{aligned}$$

где, следуя Эвальду,^{4/} параметр разбиения E выбирается из условия оптимальной сходимости обеих сумм.

Используем теперь полученное представление для исследования дифференциального сечения рассеяния (2). При этом, чтобы избежать громоздких выкладок, ограничимся двумя частными случаями - рассеянием на чистой поверхности ($\beta = \alpha$) и случаем, когда рассеяние происходит только на адатомах, образующих поверхностную решетку ($\beta = 0$). В первом случае из (2) имеем:

$$\delta(\vec{n}; \vec{n}') = 4\pi^2 a^2 N \left[1 + \frac{a}{d} (e^{i\delta} I_0 + e^{-i\delta} I_0^*) \right] \delta(\phi) \delta(\phi'), \quad (13)$$

где δ - фазовый сдвиг ($\sin \delta = \rho a$).

Отсюда с помощью выражения для $I(z)$ (12), в котором надо положить $\phi = \phi' = 0$, $z \rightarrow 0$, можно видеть, что интенсивность каждого брегговского максимума как функция энергии рассеивающихся электронов в свою очередь имеет ряд максимумов, определяющихся условием:

$$\rho = \frac{2\pi}{d} (n^2 + n'^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (14)$$

или

$$\rho = |2\pi \vec{G}|,$$

где \vec{G} - какой-либо из векторов обратной решетки. В случае произвольного угла падения, обозначив проекцию вектора \vec{P} на плоскость решетки через \vec{P}_n , это условие, очевидно, надо переписать так:

$$\rho = |\vec{P}_n + 2\pi \vec{G}|.$$

что совпадает с хорошо известным результатом, интерпретируемым обычно с помощью так называемого построения Эвальда^{3, 8/}.

При $\rho \approx \frac{2\pi}{d} (m^2 + m'^2)^{\frac{1}{2}}$, (13) принимает вид:

$$\begin{aligned} \delta(\vec{n}; \vec{n}') = 4\pi^2 a^2 N \left\{ 1 + \frac{4\pi a}{d^2 |(p^2 - 4\pi^2 G_m^2)^{\frac{1}{2}}|} \left[\cos \delta \cdot H(2\pi G_m - \rho) - \right. \right. \\ \left. \left. - \sin \delta \cdot H(\rho - 2\pi G_m) \right] \right\} \delta(\phi) \delta(\phi'), \end{aligned}$$

где

$$G_m = \frac{1}{d} (m^2 + m'^2)^{\frac{1}{2}}, \quad H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Рассмотрим теперь случай, когда $\theta = 0$. Из (2) имеем

$$\begin{aligned} d(\vec{n}; \vec{n}) &= 4\pi^2 a^2 N \theta^2 \delta(\varphi) \delta(\varphi') + a^2 N \theta (1 - \theta) - \\ &- \frac{8a^3}{d} N \cos(\delta + pd) \theta^2 (1 - e^{\beta \varepsilon}) + \frac{a^3}{d} N (e^{i\delta} I_0 + e^{-i\delta} I_0^*) \theta^2 - \\ &- 2a^2 N \left[1 + \frac{2a}{d} \cos(\delta + pd) \right] \theta^2 (1 - e^{\beta \varepsilon}) (\cos \varphi + \cos \varphi') + \\ &+ \frac{a^3}{d} N (e^{i\delta} I + e^{-i\delta} I^*) \theta^2. \end{aligned} \quad (I5)$$

С помощью (I2) и (9) легко найти, что в этом случае для каждого данного направления, характеризуемого координатами $(\varphi/2\pi, \varphi'/2\pi)$, интенсивность дифракции, как функция энергии электронов кроме обычных максимумов, определяемых условием (I4) и наблюдающиеся и в случае рассеяния чистой поверхностью, имеет дополнительные максимумы при

$$p = \frac{2\pi}{d} \left[\left(\frac{\varphi}{2\pi} + n \right)^2 + \left(\frac{\varphi'}{2\pi} + n' \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (I6)$$

Появление добавочных максимумов по сравнению со случаем чистой поверхности возможно также за счет наличия в выражении (I5) функции $\cos(\delta + pd)$, имеющей экстремальные точки при $p = \pi(n - \delta/\pi)/d$.

Возникновение при воздействии газов на чистую поверхность металлов дополнительных максимумов у интенсивности дифракции как функции энергии рассеивающихся электронов — экспериментально

известный факт, впервые установленный Руппом [3,9,10]. Для направления, характеризующегося, например, индексами (I/2, 0) из (I6) получим, что дополнительные максимумы возникают при

$$p = \frac{2\pi}{d} \left[\left(\frac{1}{2} + n \right)^2 + n'^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Этим можно объяснить наблюдавшееся в экспериментах Руппа появление добавочных максимумов полуцелого порядка. Поскольку мы рассматриваем рассеяние на квадратной решетке, а в работах [3,9,10] исследовалась дифракция на плоскости (III), то в данном случае, конечно, можно говорить только о качественном согласии с экспериментом.

При $p \approx 2\pi(m^2 + m'^2)^{\frac{1}{2}}/d$ или $p \approx 2\pi[(\varphi/2\pi + m)^2 + (\varphi'/2\pi + m')^2]^{\frac{1}{2}}/d$ (I5) соответственно можно записать так

$$\begin{aligned} d(\vec{n}; \vec{n}) &= 4\pi^2 a^2 N \theta^2 \delta(\varphi) \delta(\varphi') + a^2 N \theta (1 - \theta) - \\ &- \frac{8a^3}{d} N \cos(\delta + pd) \theta^2 (1 - e^{\beta \varepsilon}) + \frac{4\pi a^3 N}{d^2 |(\rho^2 - 4\pi^2 G_m^2)^{\frac{1}{2}}|} \left[\cos \delta \cdot \right. \\ &H(2\pi G_m - p) - \sin \delta H(p - 2\pi G_m) \left. \right] \theta^2 - 2a^2 N \left[1 + \frac{2a}{d} \cos(\delta + pd) \right] \cdot \\ &\theta^2 (1 - e^{\beta \varepsilon}) (\cos \varphi + \cos \varphi') + \frac{a^3}{d} N (e^{i\delta} I + e^{-i\delta} I^*) \theta^2, \\ d(\vec{n}; \vec{n}) &= 4\pi^2 a^2 N \theta^2 \delta(\varphi) \delta(\varphi') + a^2 N \theta (1 - \theta) - \\ &- \frac{8a^3}{d} N \cos(\delta + pd) \theta^2 (1 - e^{\beta \varepsilon}) + \frac{a^3}{d} N (e^{i\delta} I_0 + e^{-i\delta} I_0^*) \theta^2 - \\ &- 2a^2 N \left[1 + \frac{2a}{d} \cos(\delta + pd) \right] \theta^2 (1 - e^{\beta \varepsilon}) (\cos \varphi + \cos \varphi') + \\ &+ \frac{4\pi a^3 N}{d^2 |(\rho^2 - 4\pi^2 G_{m\varphi}^2)^{\frac{1}{2}}|} \left[\cos \delta H(2\pi G_{m\varphi} - p) - \sin \delta H(p - 2\pi G_{m\varphi}) \right]^2 \theta, \end{aligned}$$

где

$$G_{m\phi} = \frac{1}{d} \left[\left(\frac{\phi}{2\pi} + m \right)^2 + \left(\frac{\phi'}{2\pi} + m' \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Из (I5) и (I2), (9) видно, что дифференциальное сечение рассеяния как функция $\phi/2\pi$ и $\phi'/2\pi$ обращается в бесконечность на окружностях

$$\left(\frac{\phi}{2\pi} + n \right)^2 + \left(\frac{\phi'}{2\pi} + n' \right)^2 = \left(\frac{pd}{2\pi} \right)^2, \quad (I6)$$

радиуса $pd/2\pi$ с центрами в точках брэгговских максимумов $(-n, -n')$. При этом, если $pd > \mathcal{K}$, то окружности могут пересекаться. Тогда в точках пересечения интенсивность дифракции будет особенно велика, и эти точки естественно отождествить с пятнами на дифракционной картине. Изменение энергии рассеивающихся электронов эквивалентное изменению радиуса окружностей (I6) вызывает изменение числа таких пятен и их местоположения. Влияние энергии электронов на вид дифракционной картины наблюдалось, например, в работе /II/.

§2. Замечание о сходимости

Как следует из выражения (I2), интенсивность дифракции с учетом двукратного рассеяния может обращаться в бесконечность при определенных значениях импульса рассеивающихся электронов p . Однако, без учета двукратного рассеяния, т.е. в первом приближении, интенсивность дифракции остается конечной при любом p , и ряд теории возмущений, строго говоря, не имеет смысла. Причина этого, согласно работам Дьбка и др. /I2/, заключается в пренебрежении взаимодействием рассеивающихся электронов

с электронной плазмой твердого тела. Если предположить, что электронная "жидкость" в твердом теле однородна, указанное выше взаимодействие приводит к перенормировке электронного пропагатора

$$G_0(\vec{p}, E) = \frac{1}{E - p^2/2m + i\delta} \rightarrow \frac{1}{E - p^2/2m - \Sigma(\vec{p}, E)}. \quad (I7)$$

Здесь E - энергия электрона, \vec{p} - его импульс, $\Sigma(\vec{p}, E)$ - собственная энергия электрона, вычисляемая обычно с помощью теории возмущений. Наличие мнимой части $\Sigma(\vec{p}, E) = \Sigma_1(\vec{p}, E) - i \Sigma_2(\vec{p}, E)$ приводит благодаря затуханию начальной электронной волны к абсолютной и быстрой сходимости суммы (4).

В самом деле, затухание приводит к тому, что каждый член суммы (4) умножается на величину вида

$$\exp(-\gamma \sqrt{\kappa^2 + \kappa'^2}), \quad \gamma > 0, \quad (I8)$$

обеспечивающую быструю сходимость суммы (4) и всего ряда теории возмущений для T-матрицы в целом (см. /I, 2/):

$$T = \sum_f t_f + \sum_{f \neq f'} t_f G_0 t_{f'} + \sum_{f \neq f'; f' \neq f''} t_f G_0 t_{f'} G_0 t_{f''} + \dots \quad (I9)$$

Мы не будем производить громоздких преобразований суммы (4) с учетом перенормировки (I7) и множителей (I8), так как кроме "сглаживания" соответствующих резких максимумов интенсивности дифракции такие вычисления не дадут принципиально новых результатов. Отметим только, что критерий сходимости ряда (I9) зависит от величины коэффициента затухания γ , и поэтому получить условие применимости теории возмущений к рассеянию медленных электронов на статистической системе в явном виде довольно сложно.

§3. Учет колебаний решетки

В этом параграфе остановимся на влиянии колебаний решетки на температурную зависимость интенсивности дифракции медленных электронов. Следуя работе /1,3/, запишем полный гамильтониан системы плоская решетка плюс адсорбированный газ в виде

$$H = \sum_f \frac{P_f^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{e+m} \varphi(R_e - R_m) - \sum_f n_f - \frac{1}{2} \sum_{e+m} \varepsilon(R_e - R_m) n_e n_m, \quad (20)$$

где M - масса иона в узле f , P_f - его импульс, $\varphi(R_e - R_m)$ и $\varepsilon(R_e - R_m)$ - потенциалы парных взаимодействий ионов и адатомов, соответственно, как функции мгновенных значений разностей координат. Равновесные положения атомов и адатомов в узлах решетки $R_f^\alpha = \langle R_f^\alpha \rangle$ определяются обычными формулами

$$R_f^\alpha = \langle R_f^\alpha \rangle + u_f^\alpha \equiv f^\alpha + u_f^\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \quad (21)$$

угловые скобки в (21) обозначают усреднение с гамильтонианом (20), u_f^α - α -компонента смещения f -го иона из положения равновесия. Применяя далее вариационную процедуру Н.Н.Боголюбова и аппроксимируя гамильтониан (20) модельным гамильтонианом

$$H_0 = H_{ph} + H_s, \quad H_{ph} = \sum_f \frac{P_f^2}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{e+m} \chi_{em}^{\alpha\beta} X_{em}^\alpha X_{em}^\beta, \quad (22)$$

$$H_s = - \sum_f n_f - \frac{1}{2} \sum_{e+m} t_{em} n_e n_m, \quad X_{em}^\alpha \equiv u_e^\alpha - u_m^\alpha,$$

где $\chi_{em}^{\alpha\beta}$ и t_{em} - вариационные параметры, после выкладок, полностью аналогичных соответствующим вычислениям работы /13/, получим, что учет колебаний решетки приводит к перенормировке константы $\varepsilon \rightarrow \tilde{\varepsilon}$ согласно формуле

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon(d_0, \rho) (1 + \lambda \tilde{\psi}), \quad (23)$$

где $\tilde{\psi} \equiv \langle n_f n_g \rangle_s$, узлы f и g - ближайшие соседи, а символ $\langle \dots \rangle_s$ обозначает усреднение с гамильтонианом H_s . При получении (23) предполагалось, что решетка гармоническая, и упругие потенциалы так же, как и потенциалы взаимодействия между адатомами, рассматриваются в приближении взаимодействия лишь ближайших соседей. Кроме того, предполагалась линейная зависимость потенциала $\varepsilon(l-m)$ от изменения межатомного расстояния, а переход $\varepsilon(d_0) \rightarrow \varepsilon(d_0, \rho)$ соответствует перенормировке за счет давления ρ (d_0 - расстояние между узлами без учета перенормировки).

Тогда выражение для сечения рассеяния принимает вид (если ограничиться в (I) первой суммой)

$$d(\vec{n}, \vec{n}) = \tilde{A} \sum_{f, f'} \langle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_f - \vec{R}_{f'})} \rangle_{ph} + B \sum_{f, f'} \langle n_f n_{f'} \rangle_s \langle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_f - \vec{R}_{f'})} \rangle_{ph}, \quad (24)$$

где $\langle \dots \rangle_{ph}$ означает усреднение с гамильтонианом H_{ph} , \tilde{A} получается из A (см. /2/) заменой $\theta \rightarrow \tilde{\theta} \equiv \langle n_f \rangle_s$. Выражение $\langle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_f - \vec{R}_{f'})} \rangle_{ph}$ записывается обычно /14/ в виде разложения

$$\begin{aligned} \langle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_f - \vec{R}_{f'})} \rangle_{ph} = & e^{-2w} e^{-i\vec{q}(\vec{f} - \vec{f}')} \left\{ 1 + \right. \\ & + \frac{1}{MN} \sum_{\vec{k}_1} [\vec{q} \cdot \vec{e}_{j_1}(\vec{k}_1)]^2 E_{j_1}(\vec{k}_1) \cos \vec{k}_1(\vec{f} - \vec{f}') + \\ & + \frac{1}{2!} \frac{1}{M^2 N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{j_1, j_2} [\vec{q} \cdot \vec{e}_{j_1}(\vec{k}_1)]^2 [\vec{q} \cdot \vec{e}_{j_2}(\vec{k}_2)]^2 \\ & \cdot E_{j_1}(\vec{k}_1) E_{j_2}(\vec{k}_2) \cos \vec{k}_1(\vec{f} - \vec{f}') \cos \vec{k}_2(\vec{f} - \vec{f}') + \dots \left. \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$2W = \frac{1}{MN} \sum_{\vec{k}, j} [\vec{p} \vec{e}_j(\vec{k})]^2 E_j(\vec{k}), E_j(\vec{k}) = \frac{1}{2\omega_j(\vec{k})} \text{cth} \frac{\beta \omega_j(\vec{k})}{2}, \quad (26)$$

$\vec{e}_j(\vec{k})$ $\omega_j(\vec{k})$ - собственные векторы и собственные частоты. Соответственно выражение для сечения (24) примет вид разложения

$$\delta(\vec{n}; \vec{n}') = \left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_0 + \left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_1 + \left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_2 + \dots,$$

$$\left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_0 = \tilde{A} e^{-2W} \sum_{\vec{f}, \vec{f}'} e^{-i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')} + B e^{-2W} \sum_{\vec{f}, \vec{f}'} \langle n_f n_{f'} \rangle e^{-i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')}.$$

Для $\left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_1$ выпишем сразу окончательное выражение в полиномиальном и суперпозиционном /15, 16/ расщеплениях соответственно:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_1 &= e^{-2W} \frac{Nq_n^2}{8\pi^2 M} \left[\frac{4\pi^2 (\tilde{A} + B\tilde{f}_1^2)}{\omega(\varphi, \varphi')} \text{cth} \frac{\beta \omega(\varphi, \varphi')}{2} + \right. \\ &+ B\tilde{f}_1(1-\tilde{f}_1) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\omega(\varphi, \varphi')} \text{cth} \frac{\beta \omega(\varphi, \varphi')}{2} d\varphi d\varphi' + \\ &+ 2B(\tilde{f}_2 - \tilde{f}_1^2)(\cos\varphi + \cos\varphi') \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos\varphi}{\omega(\varphi, \varphi')} \text{cth} \frac{\beta \omega(\varphi, \varphi')}{2} d\varphi d\varphi' \left. \right], \\ \left(\frac{d\delta}{d\Omega}\right)_1 &= e^{-2W} \frac{Nq_n^2}{8\pi^2 M} \left\{ \frac{4\pi^2 (\tilde{A} + B\tilde{f}_1^2)}{\omega(\varphi, \varphi')} \text{cth} \frac{\beta \omega(\varphi, \varphi')}{2} + \right. \\ &+ B\tilde{f}_1(1-\tilde{f}_1)(1-\tilde{\lambda}^2) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{[1-2\tilde{\lambda}\cos(\varphi+\varphi')+\tilde{\lambda}^2][1+2\tilde{\lambda}\cos(\varphi+\varphi')+\tilde{\lambda}^2]} \\ &\left. \frac{1}{\omega(\varphi, \varphi')} \text{cth} \frac{\beta \omega(\varphi, \varphi')}{2} d\varphi d\varphi' \right\}, \end{aligned}$$

$\tilde{f}_1, \tilde{\lambda}$ определяются соответствующими формулами работ /15, 16/, в которых надо провести замену $\varepsilon \rightarrow \tilde{\varepsilon}$,

$$\omega(\varphi, \varphi') = 2\sqrt{\frac{f}{M}} \sqrt{1 - \frac{1}{2}(\cos\varphi + \cos\varphi')}. \quad (27)$$

Константа f , входящая в (27), определяется уравнением

$$\varphi(d) = \varphi(d_0) + \frac{f}{2}(d-d_0)^2.$$

Температурную зависимость за счет перенормировки (23)

в явном виде получить весьма трудно. Поэтому мы выделим в явном виде лишь температурную зависимость за счет перенормировки (25), ограничиваясь при этом, как это обычно делается, лишь нулевым членом разложения. В этом случае, как известно, дополнительная температурная зависимость сводится к умножению сечения рассеяния на так называемый фактор Дебая-Валлера e^{-2W} /14/. После перехода в (26) от суммирования к интегрированию получим

$$2W = \frac{q_n^2}{8\pi^2 M} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\omega(\varphi, \varphi')} \text{cth} \frac{\beta \omega(\varphi, \varphi')}{2} d\varphi d\varphi' \quad (28)$$

С учетом (27), при $\beta \rightarrow 0$ и $\beta \rightarrow \infty$ (28) можно записать соответственно:

$$2W = \frac{q_n^2}{16\pi^2 \beta f} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi d\varphi'}{1 - \frac{1}{2}(\cos\varphi + \cos\varphi')},$$

$$2W = \frac{q_n^2}{16\pi^2 \sqrt{Mf}} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi d\varphi'}{\sqrt{1 - \frac{1}{2}(\cos\varphi + \cos\varphi')}}.$$

Для высоких температур, таким образом, формулы работы ^{/2/} для определения ϵ по относительной интенсивности дополнительных пятен должны корректироваться с учетом перенормировки сечения рассеяния за счет множителя e^{-2w} .

Литература

1. А.Е.Мозольков, В.К.Федянин. ДАН СССР, 219, 393, 1974.
2. А.Е.Мозольков, В.К.Федянин. Сообщения ОИЯИ, Р17- 9530, Дубна, 1975.
3. Г.Марк, Р.Вирль. Дифракция электронов, ГТИ, 1933.
4. P.P.Ewald. Ann.Phys., 49, 1, 1916.
5. E.G.McRae. J.Chem.Phys., 45, 3258, 1966.
6. Э.Т.Уиттекер, Д.Н.Ватсон. Курс современного анализа, т.2, М., Физматгиз, 1963.
7. С.Бохнер. Лекции об интегралах Фурье, М., Физматгиз, 1962.
8. Ч.Киттель. Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1963.
9. E.Rupp. Z.Electrochem., 35, 586, 1929.
10. E.Rupp. Ann.Phys., 5, 453, 1930.
11. T.W.Naas, A.G.Jackson, M.P.Hooker, J.Chem.Phys., 46, 3025, 1967.
12. C.V.Duke, G.E.Laramore. Phys.Rev. B, 2, 3183, 3198, 1971.
13. В.А.Загребнов, В.К.Федянин. ТМФ, 10, 127, 1972.
14. А.Марадудин, Э.Монтрёлл, Дж.Вейс. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, М., Мир, 1965.
15. В.К.Федянин. В сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля" под ред. Н.Н.Боголюбова, М., Наука, 1973.
16. В.К.Федянин. Международный конгресс по магнетизму, П, М., 1974, стр.148.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 февраля 1976 года.