

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



C36
M-747

14/VI-76
P17 - 9532

2233/2-76

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

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

(Поверхностные плазмоны)

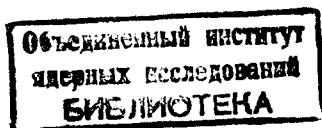
1976

P17 - 9532

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

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

(Поверхностные плазмоны)



В предыдущих работах /1-3/ мы не обсуждали количественный вклад поверхностных плазмонов в сечение рассеяния медленных электронов (некоторые качественные соображения о характере вклада плазмонов приведены в /3/). Однако во многих случаях этот вклад может иметь существенное значение /3, 4/. Настоящая работа посвящается учету вклада поверхностных плазмонов в сечение дифракции медленных электронов в модели решеточного газа.

§1. Модельный гамильтониан

Согласно работам /1, 2, 4/, полный гамильтониан системы с учетом адсорбции и поверхностных плазмонов дается выражением

$$\begin{aligned}
 H = & \rightarrow \sum_f n_f - \frac{\epsilon}{2} \sum_{\langle f_1, f_2 \rangle} n_{f_1} n_{f_2} + \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \\
 & + \sum_{\vec{k}, \vec{q}, f} C_{\vec{k}+\vec{q}}^+ C_{\vec{k}} e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} t_f(\vec{q}, \vec{k}) + \sum_{\vec{q}, \vec{k}, f} C_{\vec{k}+\vec{q}}^+ C_{\vec{k}} e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} h(f; \vec{k}, \vec{q}, \vec{k}) + \\
 & + \sum_{\vec{p}} \omega(\vec{p}) (\theta_{\vec{p}}^+ \theta_{\vec{p}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \frac{2\pi e^2}{q^2} C_{\vec{k}-\vec{q}}^+ C_{\vec{k}+\vec{q}}^+ C_{\vec{k}} C_{\vec{k}'}, \\
 & t_f(\vec{q}, \vec{k}) = -(e^{2i\delta_f(E)} - 1) / 4\pi i k m \equiv t_f(E), \\
 & h(f; \vec{k}; \vec{k}') = \sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\vec{R}_f} t_f(\vec{k}', \vec{k}, \vec{p}) (\theta_{\vec{p}}^+ + \theta_{-\vec{p}}), \quad (2)
 \end{aligned}$$

$t_f(\vec{k}', \vec{k}, \vec{p})$ - матричный элемент взаимодействия рассеивающихся электронов с плазмонами. Нетрудно убедиться, что все ре-

результаты работ /1,2/ могут быть получены с помощью теории возмущений, если ограничиться в (I) первыми четырьмя членами, причем последний из них рассматривается как малое возмущение. С целью учета вклада плазмонов разобьем теперь гамильтониан (I) на две части следующим образом:

$$H = H_0 + H_1,$$

$$H_0 = -\gamma \sum_f n_f - \frac{\epsilon}{2} \sum_{\langle f_1, f_2 \rangle} n_{f_1} n_{f_2} + \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} + \quad (3)$$

$$+ \sum_{\vec{p}} \omega(\vec{p}) \left(\theta_{\vec{p}}^+ \theta_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{q}'} \frac{2\pi e^2}{q^2} C_{\vec{k}+\vec{q}}^+ C_{\vec{k}-\vec{q}}^+ C_{\vec{k}} \cdot C_{\vec{q}},$$

$$H_1 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, f} C_{\vec{k}+\vec{q}}^+ C_{\vec{k}} e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} t_f(\vec{q}, \vec{k}) + \sum_{\vec{p}, \vec{k}, f} C_{\vec{k}+\vec{q}}^+ C_{\vec{k}} e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} h(f; \vec{k}+\vec{q}, \vec{k}).$$

Построим для гамильтониана (3) формальную временную теорию возмущений, рассматривая H_1 как малое возмущение. Сечение рассеяния связано со скоростью перехода $\dot{P}_{I \rightarrow F}$ из начального состояния $|I\rangle$ в конечное $|F\rangle$ следующим соотношением /5/:

$$\left. \frac{d^2 \delta}{d\epsilon d\Omega} \right|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'; \{n\} \rightarrow \{n'\}} = \frac{m^2}{(2\pi)^3} \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \dot{P}_{I \rightarrow F}, \quad (4)$$

$$|I\rangle = |\{n\}\rangle |\vec{k}\rangle,$$

$$|F\rangle = |\{n'\}\rangle |\vec{k}'\rangle.$$

Вероятность перехода $P_{I \rightarrow F}$ связана с амплитудой вероятности перехода между начальным и конечным состоянием $\Gamma_{I \rightarrow F}$ следующим соотношением /5/:

$$P_{I \rightarrow F} = |\Gamma_{I \rightarrow F}|^2, \quad (5)$$

где

$$\Gamma_{I \rightarrow F} = \lim_{t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty} \langle F | S(t, t_0) - 1 | I \rangle \exp[-i(E - E')t_0], \quad (6)$$

$$S(t, t_0) = \left[\exp\left(-i \int_{t_0}^t dt_1 H_1^I(t_1)\right) \right]_+, \quad (7)$$

$$H_1^I(t) = \exp(itH_0) H_1 \exp(-itH_0). \quad (8)$$

Знак "+" в (7) означает временное упорядочение операторов. Экспериментально наблюдаемое сечение рассеяния получается из (4) с помощью статистического усреднения:

$$\left. \frac{d^2 \delta}{d\epsilon d\Omega} \right|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{m^2}{(2\pi)^3} \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \langle \dot{P}_{I \rightarrow F} \rangle_T. \quad (9)$$

Общая вероятность перехода соответствующая $\langle \dot{P}_{I \rightarrow F} \rangle_T$ дается выражением

$$\langle \dot{P}_{I \rightarrow F} \rangle_T = \sum_{\{n\}, \{n'\}} P\{\{n\}\} \langle \{n'\} | \langle \vec{k}' | S(\infty, -\infty) - 1 | \vec{k} \rangle.$$

(10)

$$|\{n\}\rangle \langle \{n'\} | \langle \vec{k}' | S^+(\infty, -\infty) - 1 | \vec{k}' \rangle | \{n'\}\rangle \equiv$$

$$\equiv \langle \langle \vec{k}' | S^+(\infty, -\infty) - 1 | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | S(\infty, -\infty) - 1 | \vec{k} \rangle \rangle_T.$$

Равновесная матрица плотности $\rho\{n\}$ в (10) зависит только от H_0 :

$$\rho\{n\} = \rho\{-\} \sum_f n_f - \frac{\varepsilon}{2} \sum_{\langle f_1, f_2 \rangle} n_{f_1} n_{f_2} + \sum_{\vec{p}} \omega(\vec{p}) (\theta_{\vec{p}}^+ \theta_{\vec{p}}^- + \frac{1}{2}) \}.$$

§2. Вычисление сечения рассеяния по теории возмущений

Чтобы вычислить вероятность перехода (10), необходимо про-
извести разложение $S(t, t_0)$ по степеням взаимодействия /6/

$$S(t, t_0) = 1 + (-i) \int_{t_0}^t dt_1 H_1^I(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) + \dots \quad (II)$$

Подставляя (II) в (10), получим

$$\begin{aligned} \langle P_{I \rightarrow F} \rangle_T &= \langle \langle \vec{k}' | (i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' H_1^{I+}(t_1') | \vec{k} \rangle \langle \vec{k}' | (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 H_1^I(t_1) | \vec{k} \rangle \rangle_T + \\ &+ \langle \langle \vec{k}' | (i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' H_1^{I+}(t_1') | \vec{k} \rangle \langle \vec{k}' | (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) | \vec{k} \rangle \rangle_T + \quad (I2) \\ &+ \langle \langle \vec{k}' | (i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{t_1'}^{\infty} dt_2' H_1^{I+}(t_1') H_1^{I+}(t_2') | \vec{k} \rangle \langle \vec{k}' | (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 H_1^I(t_1) | \vec{k} \rangle \rangle_T \dots \end{aligned}$$

После подстановки H_1 из (3) в первый член (I2) найдем

$$\langle P_{I \rightarrow F} \rangle_T^{(2)} = \langle \langle \vec{k}' | (i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \sum_{\vec{r}, \vec{q}, f'} C_{\vec{r}+\vec{q}}^+(t_1') C_{\vec{r}}^-(t_1') e^{i\vec{q}\vec{R}_{f'} t_1'} t_{f'}^*(E) | \vec{k} \rangle \rangle_T.$$

$$\langle \langle \vec{k}' | (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \sum_{\vec{r}, \vec{q}, f} C_{\vec{r}+\vec{q}}^+(t_1) C_{\vec{r}}^-(t_1) e^{-i\vec{q}\vec{R}_f t_1} t_f(E) | \vec{k} \rangle \rangle_T +$$

$$+ \langle \langle \vec{k}' | (i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \sum_{\vec{q}, \vec{r}, f'} h^+(f; \vec{r}+\vec{q}, \vec{r}') (t_1') C_{\vec{r}}^+(t_1') C_{\vec{r}+\vec{q}}^-(t_1') e^{i\vec{q}\vec{R}_{f'} t_1'} | \vec{k}' \rangle \rangle_T.$$

$$\begin{aligned} &\langle \langle \vec{k}' | (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \sum_{\vec{r}, \vec{q}, f} C_{\vec{r}+\vec{q}}^+(t_1) C_{\vec{r}}^-(t_1) e^{-i\vec{q}\vec{R}_f t_1} h(f; \vec{r}+\vec{q}, \vec{r}') (t_1) | \vec{k} \rangle \rangle_T + \\ &+ \langle \langle \vec{k}' | (i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \sum_{\vec{q}, \vec{r}, f'} C_{\vec{r}}^+(t_1') C_{\vec{r}+\vec{q}}^-(t_1') e^{i\vec{q}\vec{R}_{f'} t_1'} t_{f'}^*(E) | \vec{k}' \rangle \rangle_T. \end{aligned}$$

$$\langle \langle \vec{k}' | (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \sum_{\vec{q}, \vec{r}, f} C_{\vec{r}+\vec{q}}^+(t_1) C_{\vec{r}}^-(t_1) e^{-i\vec{q}\vec{R}_f t_1} h(f; \vec{r}+\vec{q}, \vec{r}') (t_1) | \vec{k} \rangle \rangle_T^{(2)} \quad (I3)$$

$$+ \langle \langle \vec{k}' | (i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \sum_{\vec{q}, \vec{r}, f'} h^+(f; \vec{r}+\vec{q}, \vec{r}') (t_1') C_{\vec{r}}^+(t_1') C_{\vec{r}+\vec{q}}^-(t_1') e^{i\vec{q}\vec{R}_{f'} t_1'} | \vec{k}' \rangle \rangle_T.$$

$$\langle \langle \vec{k}' | (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \sum_{\vec{q}, \vec{r}, f} C_{\vec{r}+\vec{q}}^+(t_1) C_{\vec{r}}^-(t_1) e^{-i\vec{q}\vec{R}_f t_1} t_f(E) | \vec{k} \rangle \rangle_T.$$

После несложных преобразований первый член в (I3) принимает вид

$$\langle P_{I \rightarrow F} \rangle_{T1}^{(2)} = [2\pi \delta(E-E')]^2 \sum_{f, f'} \langle t_{f'}^*(E) t_f(E) \rangle_T e^{i(\vec{r}'-\vec{r})(\vec{R}_{f'}-\vec{R}_f)} \quad (I4)$$

Выражение (I4) в случае упругого рассеяния приводит к формуле для сечения рассеяния, с помощью которой были получены все результаты работ /1,2/.

Поскольку два последних члена в (I3), очевидно, дают нулевой вклад в сечение рассеяния, ограничимся рассмотрением второго члена в (I3), который можно записать в виде

$$\langle P_{I \rightarrow F} \rangle_{T2}^{(2)} = \sum_{f, f'} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(E-E')t] \langle h^+(f; \vec{r}; \vec{r}, t) \rangle_T \quad (I5)$$

$$h(f; \vec{r}; \vec{r}, 0) \rangle_T dt e^{i(\vec{r}'-\vec{r})(\vec{R}_{f'}-\vec{R}_f)}.$$

Вводя далее обозначение

$$\Lambda_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_s}(f', f, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle h^*(f', \vec{k}_1, \vec{k}_s, t) \rangle_T \quad (I6)$$

$$h(f, \vec{k}_2, \vec{k}_1, 0) \rangle_T,$$

можно переписать (I5) так:

$$\langle \hat{P}_{\Gamma \rightarrow F} \rangle_{T2}^{(2)} = \sum_{f, f'} \Lambda_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}, \vec{k}'}(f', f, E-E) \cdot e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_{f'} - \vec{R}_f)} \quad (I7)$$

Используя (2), получим

$$\langle h^*(f', \vec{k}_1, \vec{k}_s, t) h(f, \vec{k}_2, \vec{k}_1, 0) \rangle_T = \sum_{\vec{p}, \vec{q}} e^{i\vec{p}\vec{R}_{f'} - i\vec{q}\vec{R}_f} \cdot [\langle b_{\vec{p}}^+(t) b_{\vec{q}}^+ \rangle_T + \langle b_{\vec{p}}^-(t) b_{\vec{q}}^- \rangle_T + \langle b_{\vec{p}}^+(t) b_{\vec{q}}^- \rangle_T + \langle b_{\vec{p}}^-(t) b_{\vec{q}}^+ \rangle_T] \cdot \langle t_{f'}(\vec{k}_1, \vec{k}_s, \vec{p}) t_f(\vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{q}) \rangle_T \quad (I8)$$

Используя далее свойства операторов $b_{\vec{p}}, b_{\vec{p}}^+$,

$$b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}'}^+ - b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}^+ = \delta_{\vec{p}\vec{p}'}, \quad b_{\vec{p}}^- b_{\vec{p}'}^- - b_{\vec{p}}^- b_{\vec{p}}^- = \delta_{\vec{p}\vec{p}'}, \quad b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}^- - b_{\vec{p}}^- b_{\vec{p}}^+ = 0,$$

можно получить для них уравнения движения

$$i \frac{d b_{\vec{p}}^+}{dt} = b_{\vec{p}}^+ H_0 - H_0 b_{\vec{p}}^+ = \omega(\vec{p}) b_{\vec{p}}^+, \quad i \frac{d b_{\vec{p}}^-}{dt} = -\omega(\vec{p}) b_{\vec{p}}^-.$$

Уравнение для соответствующей функции Грина $G_{\vec{p}}(t-t') = \langle \langle b_{\vec{p}}^+(t); b_{\vec{p}}^+(t') \rangle \rangle$ имеет вид

$$i \frac{d G_{\vec{p}}}{dt} = \delta(t-t') + \omega(\vec{p}) G_{\vec{p}},$$

или, если ввести обозначение

$$G_{\vec{p}}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_{\vec{p}}(E) e^{-iE(t-t')} dE$$

и учесть, что

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')} dE, \quad (E - \omega(\vec{p})) G_{\vec{p}}(E) = \frac{1}{2\pi}. \quad (I9)$$

Спектральная интенсивность соответствующей корреляционной функции $J_{\vec{p}}(\omega)$

$$\langle b_{\vec{p}}^+(t') b_{\vec{p}}^+(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J_{\vec{p}}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (20)$$

определяется, согласно /7/, по формуле

$$J_{\vec{p}}(\omega) = \frac{i}{e^{\beta\omega} - 1} [G_{\vec{p}}(\omega + i\varepsilon) - G_{\vec{p}}(\omega - i\varepsilon)]. \quad (2I)$$

Подстановка (I9) в (2I) дает

$$J_{\vec{p}}(\omega) = \frac{\delta(\omega - \omega(\vec{p}))}{e^{\beta\omega} - 1}. \quad (22)$$

С помощью (20) и (22) находим

$$\langle b_{\vec{p}}^+(t) b_{\vec{p}}^+ \rangle = \frac{e^{i\omega(\vec{p})t}}{e^{\beta\omega(\vec{p})} - 1}. \quad (23)$$

Аналогично

$$\langle \theta_{\vec{p}}(t) \theta_{\vec{p}}^+ \rangle = \frac{e^{\beta \omega(\vec{p})}}{e^{\beta \omega(\vec{p})} - 1} e^{-i \omega(\vec{p}) t} \quad (24)$$

Подставляя (23) и (24) в (17) и (18), получим

$$\Lambda_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n}(\vec{f}, \vec{f}', \omega) = - \sum_{\vec{p}} \langle t_{\vec{f}'}^*(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{p}) t_{\vec{f}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{p}) \rangle_{\mathcal{T}} e^{-i \vec{p}(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} N(-\omega) 2i \operatorname{Im} \mathcal{D}(\vec{p}, \omega), \quad (25)$$

$$N(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \omega} - 1}, \quad \mathcal{D}(\vec{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega(\vec{p}) + i \Gamma(\vec{p})} - \frac{1}{\omega + \omega(\vec{p}) + i \Gamma(\vec{p})}, \quad (26)$$

где символ Im включает в себя i , а $\Gamma(\vec{p})$, согласно /4, 8/, появляется при учете взаимодействия плазмонов с валентными электронами. Подстановка (25) и (17) дает

$$\langle \dot{P}_{I \rightarrow F} \rangle_{\mathcal{T}_2}^{(2)} = - \sum_{\vec{f}, \vec{f}', \vec{p}} \langle t_{\vec{f}'}^*(\vec{k}', \vec{k}; \vec{p}) t_{\vec{f}}(\vec{k}', \vec{k}; \vec{p}) \rangle_{\mathcal{T}} e^{-i \vec{p}(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} N(-\omega) 2i \operatorname{Im} \mathcal{D}(\vec{p}, \omega) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} \quad (27)$$

Дифференцируя далее (14) по времени и складывая с (27), получим

$$\langle \dot{P}_{I \rightarrow F} \rangle_{\mathcal{T}}^{(2)} = \sum_{\vec{f}, \vec{f}'} [2\pi \delta(E - E') \langle t_{\vec{f}'}^*(E) t_{\vec{f}}(E) \rangle_{\mathcal{T}} + \sum_{\vec{p}} 2i N(-\omega) \operatorname{Im} \mathcal{D}(\vec{p}, \omega) e^{-i \vec{p}(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} \langle t_{\vec{f}'}^*(\vec{p}) t_{\vec{f}}(\vec{p}) \rangle_{\mathcal{T}}] e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} \quad (28)$$

Подставив (28) в (9), будем иметь окончательно

$$\frac{d^2 \mathcal{J}}{d \epsilon d \Omega} \Big|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{m^2}{(2\pi)^3} \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \sum_{\vec{f}, \vec{f}'} [2\pi \delta(E - E') \langle t_{\vec{f}'}^*(E) t_{\vec{f}}(E) \rangle_{\mathcal{T}} + \sum_{\vec{p}} 2i N(-\omega) \operatorname{Im} \mathcal{D}(\vec{p}, \omega) e^{-i \vec{p}(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} \langle t_{\vec{f}'}^*(\vec{p}) t_{\vec{f}}(\vec{p}) \rangle_{\mathcal{T}}] e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_{\vec{f}} - \vec{R}_{\vec{f}'})} \quad (29)$$

§3. Обсуждение результатов

Вклад первого члена в (29) подробно обсуждался в наших предыдущих работах /1, 2/. Здесь мы остановимся на подробном анализе вклада второго члена, обусловленного взаимодействием рассеивающихся электронов с плазмонами. Согласно работе /4/, параметры, характеризующие поверхностные плазмоны и фигурирующие в (29), даются формулами

$$t_{\vec{f}}(\vec{p}) = \left(\frac{\pi e^2 \omega_s \Omega^2}{\rho_{11}} \right)^{1/2} \delta_{\rho_{\pm}, \pm i \rho_{11}} \theta(\rho_c - \rho_{11}), \quad (30)$$

$$\omega(\vec{p}_{11}) = \omega_s + \beta_s \rho_{11}, \quad (31)$$

$$\Gamma(\vec{p}_{11}) = \frac{\pi}{2^4} \omega_s^{3/2} \left(\frac{\rho_{11}^2}{2m} \right)^{1/2}. \quad (32)$$

Знак в δ -функции в (30) выбирается из условия сходимости суммы (2), Ω - объем элементарной ячейки, ρ_c - максимальное плазмонное волновое число.

Так как, согласно (30), $t_f(\vec{p})$ не зависит от f , то суммирование по f, f' в (29) дает

$$\sum_{f, f'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k} + \vec{p})(\vec{R}_{f'} - \vec{R}_f)} = N(2\pi)^2 \delta(\vec{p}_0 - \vec{k}_0 + \vec{k}'_0).$$

Поэтому суммирование по \vec{p}_0 в (29) сведется к замене $\vec{p}_0 \rightarrow \vec{k}_0 - \vec{k}'_0$. Обозначив $\vec{k}_0 - \vec{k}'_0 \equiv \vec{q}_0$, второй член в (29) можно переписать так:

$$\left. \frac{d^2 \sigma}{d\epsilon d\Omega} \right|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{Nim^2 |\vec{k}'|}{\pi |\vec{k}|} N(\omega) \sum_{p_1} \text{Im} \mathcal{D}(p_1, \vec{q}_0; \omega) |t_f(p_1, \vec{q}_0)|^2. \quad (33)$$

Учитывая далее, что $\omega = E - E'$, и используя (26) и (30), (33) можно представить в виде

$$\left. \frac{d^2 \sigma}{d\epsilon d\Omega} \right|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{Nim^2 |\vec{k}'|}{\pi |\vec{k}|} \frac{1}{e^{\beta(E-E')} - 1} \text{Im} \left[\frac{1}{E - E' - \omega(\vec{q}_0) + i\Gamma(\vec{q}_0)} - \frac{1}{E - E' + \omega(\vec{q}_0) + i\Gamma(\vec{q}_0)} \right] \frac{\pi e^2 \omega_s \Omega^2}{q_0} \theta(p_c - q_0), \quad (34)$$

где величины $\omega(\vec{q}_0)$ и $\Gamma(\vec{q}_0)$ определяются выражениями (31) и (32), соответственно. Взяв мнимую часть от выражения в квадратных скобках в (34), окончательно будем иметь

$$\left. \frac{d^2 \sigma}{d\epsilon d\Omega} \right|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = 4Nm^2 \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \frac{e^2 \omega_s \Omega^2}{q_0} \theta(p_c - q_0) \frac{1}{e^{\beta(E-E')} - 1} \frac{(E-E') \Gamma(\vec{q}_0) \omega(\vec{q}_0)}{[(E-E' - \omega(\vec{q}_0))^2 + \Gamma^2(\vec{q}_0)] [(E-E' + \omega(\vec{q}_0))^2 + \Gamma^2(\vec{q}_0)]}.$$

Возвращаясь к (29), получим выражение для полного сечения рассеяния медленных электронов с учетом вклада плазмонов

$$\left. \frac{d^2 \sigma}{d\epsilon d\Omega} \right|_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{m^2 |\vec{k}'|}{(2\pi)^2 |\vec{k}|} \delta(E-E') \sum_{f, f'} \langle t_{f'}^*(E) t_f(E) \rangle_T e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_{f'} - \vec{R}_f)} + 4Nm^2 \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \frac{e^2 \omega_s \Omega^2}{q_0} \frac{\theta(p_c - q_0)}{e^{\beta(E-E')} - 1}. \quad (35)$$

$$\frac{(E-E') \Gamma(\vec{q}_0) \omega(\vec{q}_0)}{[(E-E' - \omega(\vec{q}_0))^2 + \Gamma^2(\vec{q}_0)] [(E-E' + \omega(\vec{q}_0))^2 + \Gamma^2(\vec{q}_0)]}.$$

Отсюда прежде всего видно, что плазмоны дают ненулевой вклад только при $q_0 = |\vec{k} - \vec{k}'| < p_c$. Из (35) также можно заключить, что сечение рассеяния электронов как функция разности их энергий до и после рассеяния $E - E'$ кроме резкого максимума при $E - E' = 0$, соответствующего упругому рассеянию, имеет еще один максимум при $E - E' \neq 0$, появление которого объясняется, очевидно, вкладом поверхностных плазмонов. Легко видеть, что при $\Gamma(\vec{q}_0) \approx 0$ этот "плазменный пик" наблюдается при $E - E' \approx \omega(\vec{q}_0)$. Поскольку величины $\omega(\vec{q}_0)$ и $\Gamma(\vec{q}_0)$ в (35) зависят только от $|\vec{q}_0|$, эффекты, связанные с поверхностными плазмонами, создают равномерный фон по всей дифракционной картине. В образовании четкой дифракционной картины, состоящей из основных и дополнительных пятен, таким образом, участвует лишь первый член в выражении (34). Поэтому можно утверждать, что в модели /3/, в которой $t_f(\vec{p})$ не зависит от f , характерный для дифракции медленных электронов рисунок создается лишь упруго рассеивающимися электронами.

§4. Заключение

Таким образом, в рамках изотропного рассеяния, приняв в качестве модели адсорбции решеточный газ с взаимодействием ближайших соседей, мы рассмотрели основные закономерности дифракции медленных электронов. В приближении однократного рассеяния удалось точно решить задачу о дифракции на одномерных цепочках (полимерах). Для двух типов двумерных решеток – квадратной и треугольной – было установлено существование дифракционных картин, соответствующих хорошо известным поверхностным структурам $C(2 \times 2)$ и $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$. При этом было четко показано, что появление дополнительных пятен при напылении газа на чистую поверхность металла обусловлено в первую очередь эффектами корреляций между адатомами. Получены хорошо согласующиеся с экспериментом формулы для определения феноменологической константы взаимодействия адатомов E при известной относительной интенсивности дополнительных пятен при двух различных температурах.

Учет двукратного рассеяния позволил объяснить хорошо известный из экспериментов факт появления дополнительных максимумов у интенсивности дифракции медленных электронов как функции энергии рассеивающихся электронов при напылении газов на чистые поверхности металлов. Кроме того, с учетом двукратного рассеяния можно объяснить существование более сложных дифракционных картин, чем упомянутые выше, и переход одних дифракционных картин в другие при изменении энергии рассеивающихся электронов.

Учет колебаний решетки привел к перенормировке константы эффективного взаимодействия E , а также к перенормировке сечения рассеяния за счет фактора Дебая-Валлера e^{-2W} . Последний дает особенно существенную поправку при высоких температурах, что необходимо учитывать при определении феноменологической константы E по относительной интенсивности дополнительных пятен.

Можно учесть также вклад в сечение рассеяния поверхностных плазмонов, который для медленных электронов является более существенным, чем вклад фононов. Анализ выражения для сечения рассеяния электронов с учетом взаимодействия электронов с поверхностными плазмонами показал, что последние дают вклад в сечение рассеяния только тогда, когда проекция передачи импульса на плоскость решетки не превышает максимальное плазмонное волновое число. Показано также, что сечение рассеяния электронов как функция разности их энергий до и после рассеяния кроме δ -образного максимума при разности энергий равной нулю, соответствующего упругому рассеянию, имеет еще один максимум ("плазмонный пик"). Оказывается также, что в принятой модели взаимодействия электронов с плазмонами характерная для дифракции медленных электронов картина создается лишь упруго рассеивающимися электронами. Эффекты же, связанные с поверхностными плазмонами, дают лишь равномерный фон по всей дифракционной картине.

Следовательно, предложенная выше теория дифракции медленных электронов на однородной поверхности, основанная на квантовостатистической модели адсорбции, позволила объяснить ряд наиболее существенных аспектов данной проблемы и будет, мы думаем,

первым шагом на пути к построению вполне "рабочей" теории, объясняющей все многообразие явлений, наблюдавшихся в экспериментах по дифракции медленных электронов при наличии адсорбции.

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. А.Е.Мозольков, В.К.Федянин. Сообщения ОИЯИ, Р17-9531, Дубна, 1975.
4. С.В.Duke, G.E.Laramore. Phys.Rev. B, 3, 3183, 3198, 1971.
5. С.В.Duke, G.E.Laramore. Phys.Rev. B, 2, 4765, 1970.
6. Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков. Введение в теорию квантованных полей, М., Наука, 1973.
7. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ДАН СССР, 126, 53, 1959.
8. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., Физматгиз, 1962.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 февраля 1976 года.