СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P17 - 9934

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

ДИФРАКЦИЯ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ В МОДЕЛИ РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА

IV. Многократное рассеяние

1976

P17 - 9934

А.Е.Мозольков, В.К.Федянин

ДИФРАКЦИЯ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ В МОДЕЛИ РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА

IV. Многократное рассеяние

где $\vec{p}$ и $\vec{p}'$ – волновые векторы начальной и дифрагированной волн соответственно ; $\vec{R}_f$ – координата f -го рассеивателя; $n_f = 1$, если узел f занят; $n_f = 0$, если узел f свободен;

$$c = a\left(\sqrt{1-p^2a^2} + ipa\right), \quad \text{где}$$

a -параметр размерности длины ($a>0$). Чтобы получить дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 \hbar^2 \left\langle |T(\vec{p}',\vec{p})|^2 \right\rangle, \tag{2}$$

необходимо усреднить квадрат модуля $T(\vec{p}',\vec{p})$ (I) по всем конфигурациям адатомов, на которых происходит рассеяние. При усреднении воспользуемся аналогом суперпозиционного расцепления для регулярных систем[4,5]

$$\langle n_{f_1} n_{f_2} \dots n_{f_N} \rangle = \langle n_{f_1} n_{f_2} \rangle \frac{1}{\theta} \langle n_{f_2} n_{f_3} \rangle \frac{1}{\theta} \dots \frac{1}{\theta} \langle n_{f_{N-1}} n_{f_N} \rangle. \tag{3}$$

(В работе[6] это приближение называется "квазикристаллическим"). Используя соотношение (3) в выражении (I), необходимо учесть, что во всех суммах этого ряда, начиная со второй, операторы n_f , $n_{f'}$, ... занимают "неравноправное" положение по отношению к экспоненциальным множителям, и произвести соответствующую симметризацию. Тогда для частично усредненной матрицы амплитуды рассеяния $T(\vec{p}',\vec{p})_{av}$ получим ряд

$$T(\vec{p}',\vec{p})_{av} = -\frac{c}{(2\pi)^2 m\hbar}\sum_f n_f \Big[e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{R}_f} + \frac{1}{2}\sum_{f'}{}' c \Big(\langle n_f n_{f'}\rangle \frac{1}{\theta} e^{-i(\vec{p}'\vec{R}_f - \vec{p}\vec{R}_{f'})} \frac{e^{ip|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|} +$$
$$+ \langle n_{f'} n_f\rangle \frac{1}{\theta} e^{-i(\vec{p}'\vec{R}_{f'} - \vec{p}\vec{R}_f)} \frac{e^{ip|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|} \Big) +$$
$$+ \frac{1}{3}\sum_{f'\neq f''}{}' c^2 \Big(\langle n_f n_{f'}\rangle \langle n_{f'} n_{f''}\rangle \frac{1}{\theta^2} e^{-i(\vec{p}'\vec{R}_f - \vec{p}\vec{R}_{f''})} \cdot \tag{4}$$
$$\frac{e^{ip|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|} \frac{e^{ip|\vec{R}_{f'} - \vec{R}_{f''}|}}{|\vec{R}_{f'} - \vec{R}_{f''}|} + \langle n_{f'} n_f\rangle \langle n_f n_{f''}\rangle \frac{1}{\theta^2} \cdot$$
$$e^{-i(\vec{p}'\vec{R}_{f'} - \vec{p}\vec{R}_{f''})} \frac{e^{ip|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f'}|} \frac{e^{ip|\vec{R}_f - \vec{R}_{f''}|}}{|\vec{R}_f - \vec{R}_{f''}|} +$$
$$+ \langle n_{f''} n_{f'}\rangle \langle n_{f'} n_f\rangle \frac{1}{\theta^2} e^{-i(\vec{p}'\vec{R}_{f''} - \vec{p}\vec{R}_f)} \frac{e^{ip|\vec{R}_{f''} - \vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_{f''} - \vec{R}_{f'}|} \frac{e^{ip|\vec{R}_{f'} - \vec{R}_f|}}{|\vec{R}_{f'} - \vec{R}_f|} + \dots \Big].$$

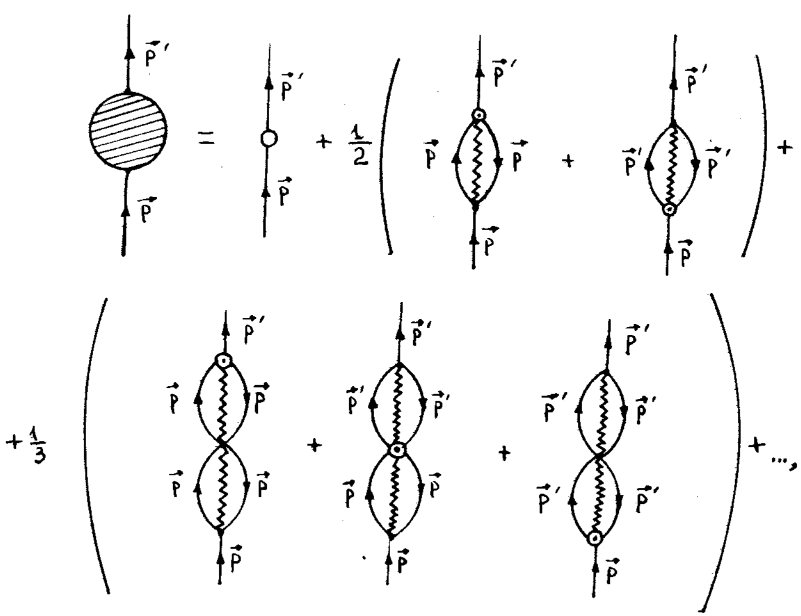
Если ввести обозначение

$$G_1(\vec{k}) = \frac{c}{\theta} \sum_{f'}{}' \langle n_f n_{f'} \rangle e^{i\vec{k}(\vec{R}_{f'}-\vec{R}_f)} \frac{e^{ip|\vec{R}_f-\vec{R}_{f'}|}}{|\vec{R}_f-\vec{R}_{f'}|}, \tag{5}$$

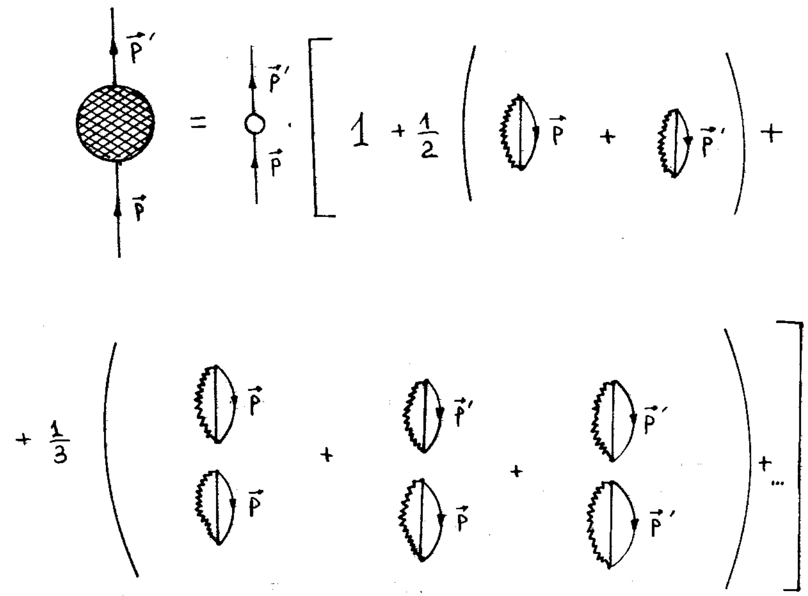
то (4) примет следующий вид:

$$T(\vec{p}';\vec{p})_{av} = -\frac{c}{(2\pi)^2 m\hbar} \sum_f n_f e^{-i\vec{q}\vec{R}_f} \Big[1 + \frac{1}{2}\big(G_1(\vec{p}) + G_1(\vec{p}')\big) + \frac{1}{3}\big(G_1^2(\vec{p}) + G_1(\vec{p})G_1(\vec{p}') + G_1^2(\vec{p}')\big) + \dots \Big]. \tag{6}$$

Проведенную выше операцию суперпозиционного расщепления T-матрицы удобно представить графически. Действительно, если для симметризованной T -матрицы принять представление



то частично усредненная матрица амплитуды рассеяния $T(\vec{p}';\vec{p})_{av}$ будет иметь вид графического разложения , а именно



Сумму в квадратных скобках в (6), которую мы обозначим через Q , нетрудно вычислить (см., например[6]). В самом деле, если ввести обозначения

$$G_1(\vec{p}) = u, \qquad G_1(\vec{p}') = v, \tag{7}$$

будем иметь

$$Q = 1 + \frac{1}{2}(u+v) + \frac{1}{3}(u^2 + uv + v^2) +$$

$$+\frac{1}{4}(u^3+u^2v+uv^2+v^3)+\ldots=$$

$$=\left(1+\frac{1}{2}u+\frac{1}{3}u^2+\frac{1}{4}u^3+\ldots\right)+\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{3}u+\frac{1}{4}u^2+\ldots\right)+$$

$$+\left(\frac{1}{3}+\frac{1}{4}u+\ldots\right)+\ldots=\ln(1-u)^{-1}u^{-1}+\ln(1-u)^{-1}u^{-2}v-$$

$$-u^{-1}v+\ln(1-u)^{-1}u^{-3}v^2-u^{-2}v^2-\frac{1}{2}u^{-1}v^2+\ldots=$$

$$=\ln(1-u)^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}u^{-n-1}v^n-\sum_{n=0}^{\infty}u^{-n-1}v^n\ln(1-v)^{-1}. \qquad (8)$$

Если при группировке членов поменять ролями u и v, то для Q можно получить другое представление

$$Q=\sum_{n=0}^{\infty}u^n v^{-n-1}\ln(1-v)^{-1}-\ln(1-u)^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}u^n v^{-n-1}. \qquad (9)$$

В зависимости от соотношения между u и v сходится только один из рядов (8), (9). Если, например, $|v/u|<1$, то из (8) получим

$$Q=\frac{1}{u-v}\ln\frac{1-v}{1-u}. \qquad (10)$$

Такое же вырежение для Q получается из (9) в случае, если $|u/v|<1$.

Подставляя (10) в (6) и учитывая (7), находим

$$T(\vec{p}',\vec{p})_{av}=-\frac{c\,Q(\vec{p}',\vec{p})}{(2\pi)^2 m k}\sum_f n_f e^{-i\vec{q}\vec{R}_f}, \qquad (11)$$

где $Q(\vec{p}',\vec{p})$ определяется формулой (10). Подстановка (11) в (2) дает выражение для дифференциального сечения изотропного упругого рассеяния электронов в суперпозиционном приближении с учетом всех порядков теории возмущений

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|c|^2|Q(\vec{p}',\vec{p})|^2\sum_{f,f'}\langle n_f n_{f'}\rangle e^{-i\vec{q}(\vec{R}_f-\vec{R}_{f'})}. \qquad (12)$$

При этом надо помнить, что для получения последовательных результатов парный коррелятор в (12), а также парные корреляторы, использующиеся при вычислении $Q(\vec{p}',\vec{p})$ по формулам (10), (5), необходимо брать в суперпозиционном расщеплении/4,5/.

Рассмотрим теперь рассеяние на квадратной решетке при $\theta=\frac{1}{2}$ и низких температурах. Тогда подстановкой парного коррелятора в суперпозиционном расцеплении/4,5/

$$\langle n_0 n_{kk'}\rangle=\theta^2+\theta(1-\theta)(-1)^{k+k'} \qquad (13)$$

в (12) получим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\pi^2a^2|Q(\vec{p}',\vec{p})|^2\theta^2 N\,\delta(\phi)\delta(\phi')+$$

$$+4\pi^2a^2|Q(\vec{p}',\vec{p})|^2\theta(1-\theta)N\,\delta(\phi+\pi)\delta(\phi'+\pi) \qquad (14)$$

(δ - функции в (I4) имеют период 2π). При вычислении величины $Q(\vec{p}',\vec{p})$ рассмотрим, как и в предыдущих наших работах/I,3/, случай нормального падения. Тогда согласно (5) имеем

$$G_1(\vec{p}) = N\frac{c}{\theta d}\sum_{\substack{\kappa,\kappa' \\ (\kappa^2+\kappa'^2>0)}}' \langle n_0 n_{\kappa\kappa'}\rangle \frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}, \qquad (I5)$$

$$G_1(\vec{p}') = N\frac{c}{\theta d}\sum_{\substack{\kappa,\kappa' \\ (\kappa^2+\kappa'^2>0)}}' \langle n_0 n_{\kappa\kappa'}\rangle e^{-i(\kappa\phi+\kappa'\phi')} \frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}, \qquad (I6)$$

где d -постоянная решетки, $\phi=\vec{q}\,\vec{j}\,d$, $\phi'=\vec{q}\,\vec{j}'d$, $\vec{j}$, $\vec{j}'$ -орты декартовой прямоугольной системы координат. Подставляя в (I5) и (I6) выражение для парного коррелятора в суперпозиционном расцеплении (I3) , получим

$$G_1(\vec{p}) = Nc\theta I_0\frac{1}{d} + Nc(1-\theta)\frac{1}{d}\sum_{\substack{\kappa,\kappa' \\ (\kappa^2+\kappa'^2>0)}}' (-1)^{\kappa+\kappa'}\frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}, \qquad (I7)$$

$$G_1(\vec{p}') = Nc\theta\frac{1}{d}I + Nc(1-\theta)\frac{1}{d}\sum_{\substack{\kappa,\kappa' \\ (\kappa^2+\kappa'^2>0)}} (-1)^{\kappa+\kappa'} e^{-i(\kappa\phi+\kappa'\phi')}\frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}, \qquad (I8)$$

где I_0 и I определяются выражениями

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

$$I = \sum_{\substack{\kappa,\kappa' \\ (\kappa^2+\kappa'^2>0)}} e^{-i(\kappa\phi+\kappa'\phi')}\frac{e^{ipd\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}}{\sqrt{\kappa^2+\kappa'^2}}, \qquad (I9)$$

которые подробно анализировались в работе/I/. Учитывая,что

$$(-1)^{\kappa+\kappa'} = e^{-i\pi(\kappa+\kappa')},$$

из (I9) легко видеть, что вторая сумма в (I7) есть I при $\phi=\phi'=\pi$, а вторая сумма в (I8) получается из I заменой $\phi\to\phi+\pi$, $\phi'\to\phi'+\pi$. Поэтому согласно/I/ $G_1(\vec{p})$, как функция волнового вектора $\vec{p}$, имеет максимальные значения при

$$p=\frac{2\pi}{d}(n^2+n'^2)^{\frac{1}{2}}, \quad p=\frac{2\pi}{d}\left[(n+\tfrac{1}{2})^2+(n'+\tfrac{1}{2})^2\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (20)$$

а $G_1(\vec{p}')$ имеет максимумы при

$$p=\frac{2\pi}{d}\left[(n+\tfrac{\phi}{2\pi})^2+(n'+\tfrac{\phi'}{2\pi})^2\right]^{\frac{1}{2}}, \quad p=\frac{2\pi}{d}\left[(n+\tfrac{1}{2}+\tfrac{\phi}{2\pi})^2+(n'+\tfrac{1}{2}+\tfrac{\phi'}{2\pi})^2\right]^{\frac{1}{2}}. \qquad (2I)$$

Анализ выражения для сечения рассеяния (I4) с учетом (I0), (I7), (I8),(20),(2I)показывает,что адсорбция приводит к появлению максимумов полуцелого порядка у интенсивности дифракции как функции энергии рассеивающихся электронов не только для дополнительных пятен, как в случае учета лишь двукратного рассеяния, но и для основных пятен. Это находится в хорошем согласии с экспериментами Руппа по изучению дифракции медленных электронов при адсорбции водорода на никеле /7-9/, а также со многими другими экспериментами, в которых при наличии адсорбции наблюдалась более тонкая энергетическая структура основных и дополнительных пятен, чем в случае чистой поверхности.

Следует подчеркнуть, что условие сходимости логарифмических рядов (8), (9), а следовательно, и условие применимости теории возмущений к описанию рассеяния медленных электронов выражаются следующими неравенствами:

$$|G_1(\vec{p})| < 1, \quad |G_1(\vec{p}')| < 1.$$

Как отмечалось в работе /1/, эти неравенства выполняются при учёте взаимодействия рассеивающихся электронов с электронной "жидкостью" тела. Тогда при значениях волнового вектора $\vec{p}$, определяемых условиями (20), (21), величины $|G_1(\vec{p})|$, $|G_1(\vec{p}')|$ будут не бесконечными, как в случае чисто упругого рассеяния, а близкими к единице.

Литература

1. А.Е. Мозольков, В.К. Федянин. Сообщения ОИЯИ, Р17-9531, Дубна, 1976.
2. А.Е. Мозольков, В.К. Федянин. ДАН СССР, 219, 393, 1974.
3. А.Е. Мозольков, В.К. Федянин. Сообщения ОИЯИ, Р17-9530, Дубна, 1976.
4. В.К. Федянин. В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля, под ред. Н.Н. Боголюбова, "Наука", 1973.
5. В.К. Федянин. Международный конгресс по магнетизму, II, М., 1974, стр. 148; Ю.К. Товбин, В.К. Федянин. ТМФ, 24, 129, 1975
6. C.B.Duke, A.Liebsch. Phys. Rev., B, 9, 1126; 1150, 1974.
7. E.Rupp. Z.Electroch., 35, 586, 1929.
8. E.Rupp. Ann. Phys., 5, 453, 1930.
9. Г. Марк, Р. Вирль. Дифракция электронов, ГТТИ, 1933.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 июля 1976 года.