

ных корней получен в [6]. Однако появление почти вертикальной ветви, соответствующей чисто мнимым корням, можно объяснить только пьезоэлектрической связью. На основе дисперсионных кривых для каждого Ω можно определить фазовую и групповую скорости распространения возмущения в плоском волноводе.

Последняя, как известно, характеризует перенос энергии. Здесь, по-видимому, представляет интерес исследование распределения переносимой энергии при фиксированной частоте по отдельным модам, соответствующим дисперсионным кривым. Однако такой анализ можно провести, решив конкретную краевую задачу, т. е. определив функции $m_k(\xi, \eta)$, $n_k(\xi, \eta)$ (модули пьезокерамики ЦТС-19 взяты из [9]).

Поступила 30 XII 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Tiersten H. F., Mindlin R. D. Forced vibrations of piezoelectric crystal plates.— «Quart. Appl. Math.», 1962, vol. 20, p. 107.
2. Mindlin R. D. High frequency vibrations of piezoelectric crystal plates.— «Int. J. Solids and Struct.», 1972, vol. 8, N 7.
3. Lyraciewicz V., Filipczynski L. Vibrations of piezoelectric ceramic transducers loaded mechanically.— «Proc. Vibr. Probl.», 1972, vol. 11, N 3.
4. Аксентян О. К., Ворович И. И. Напряженное состояние плиты малой толщины.— ПММ, 1963, т. 28, вып. 6.
5. Коцаренко Н. Я. и др. Электронное затухание и усиление волн Лэмба в пьезополупроводниках.— УФЖ, 1971, т. 16, № 10.
6. Ивина Н. Ф., Касаткин Б. А. Нормальные волны в анизотропном пьезоактивном волноводе — «Дефектоскопия», 1975, № 4.
7. Вайнберг М. М., Треногин В. А. Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М., «Наука», 1969.
8. Нигул У. К. О корнях уравнения ЛЭМБА для деформации плиты, антисимметричной относительно срединной поверхности.— «Изв. АН ЭССР», 1963, т. 12, № 3.
9. Смажеская Е. Г., Фельдман Н. Б. Пьезоэлектрическая керамика. М., «Сов. радио», 1971.

УДК 539.121.7

МОДЕЛЬ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ АТОМА НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА В ИМПУЛЬСНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

А. Е. Галанов

(Новосибирск)

1. Цель данной работы — получить дифференциальное сечение однократного рассеяния атома на простом кристалле. Взаимодействие в системе определяется в виде суммы парных потенциалов взаимодействия частицы с атомами решетки. Принимается, что процессы, приводящие к рассеянию, слабо зависят от процессов, приводящих к связи и тепловому выравниванию в кристалле. Поэтому рассматривается гармоническое приближение для гамильтониана кристалла [1] и импульсное приближение с «квазиклассической связью» для описания рассеяния [2, 3]. Будем

считать, что скорости частиц велики по сравнению с тепловыми скоростями атомов решетки, а интерференционные эффекты несущественны. Тогда дифференциальное сечение рассеяния в интервалах углов $d\Omega$ и энергий dE_2 , отнесенное к одному центру рассеяния, имеет вид ($\hbar = 1$) [2]

$$(1.1) \quad \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_2} = \frac{k_2}{k_1} (1 + \mu)^2 |F|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-iE\tau'} \langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{u}(0)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{u}(\tau')} \rangle_T,$$

где $\mu = m/M$ — отношение масс частицы и атома решетки; $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$, $E = E_1 - E_2$ — изменения импульса и энергии частицы при одном столкновении; \mathbf{u} — смещение центра около положения узла; $F = F(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa})$ — амплитуда одночастичного рассеяния в ц-системе частицы и центра рассеяния — берется вне энергетической поверхности

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}_1/(1 + \mu), \quad \boldsymbol{\kappa}' = (\mathbf{k}_2 - \mu\mathbf{k}_1)/(1 + \mu);$$

$\langle \dots \rangle$ означает среднее по исходному состоянию кристалла и среднее по каноническому распределению при заданной температуре T кристалла. При выводе формулы (1.1) учитываются законы сохранения для всей системы частица — кристалл [2]. Полагая, что однократным столкновениям соответствуют только столкновения с верхними атомами, из суммы по всем центрам выделим сумму только по верхним.

2. В (1.1) произведено суммирование по всем конечным состояниям. Однако известно [3], что в импульсном приближении для каждого направления рассеяния \mathbf{k}_2/k_2 сечение имеет вид резких пиков только вблизи состояний, соответствующих отдаче центра, как если бы он был свободен. Будем учитывать переходы только в такие состояния, а их энергии возбуждения определим как действительные корни уравнений $a_1(E) = 0$ или $a_1^2(E) = a_2(E)$, найденные следующим образом.

Запишем выражения для автокоррелятора из (1.1) в фоновом представлении [2]

$$(2.1) \quad \exp \left\{ \sum_{j, \mathbf{q}} \frac{(\mathbf{k} \mathbf{e}_j(\mathbf{q}))^2}{2NM\omega_j(\mathbf{q})} \{ \langle 2n_j(\mathbf{q}) + 1 \rangle [\cos(\omega_j(\mathbf{q})\tau') - 1] + i \sin(\omega_j(\mathbf{q})\tau') \} \right\},$$

где \mathbf{q} , $\omega_j(\mathbf{q})$, $\mathbf{e}_j(\mathbf{q})$ — волновой вектор, частота и вектор поляризации фонона; j — индекс поляризации; $\langle n_j(\mathbf{q}) \rangle$ — распределение Планка. И разложим в ряд по τ' подэкспоненциальное выражение в подынтегральной функции в (1.1) с учетом (2.1)

$$(2.2) \quad e^{-iE\tau'} \langle \dots \rangle_T = \exp \left\{ -ia_1\tau' - \bar{a}_2 \frac{\tau'^2}{2} + \dots \right\};$$

$$(2.3) \quad a_1 = E - \sum_{j, \mathbf{q}} \frac{(\mathbf{k} \mathbf{e}_j(\mathbf{q}))^2}{2NM}, \quad a_2 = \frac{\langle (\mathbf{k} \mathbf{p}_v)^2 \rangle}{M^2} = \sum_{j, \mathbf{q}} \frac{(\mathbf{k} \mathbf{e}_j(\mathbf{q}))^2 \omega_j(\mathbf{q})}{2NM} \times \langle 2n_j(\mathbf{q}) + 1 \rangle,$$

где \mathbf{p}_v — определенный импульс центра до рассеяния. Из вида разложения (2.2) следует, что сумма в a_1 имеет смысл энергии отдачи, равна $k^2/2M$ только для изотропного кристалла и, следовательно, зависит от динамики поверхности. Будем считать законом сохранения энергии для трех тел (частица, неподвижный центр и бесконечная масса) уравнение $a_1(E) = 0$. В случае подвижного (в системе узла) центра заменим в уравнении $E - k^2/2M = (\mathbf{k} \mathbf{p}_v)/M$ левую часть на a_1 и осредним по ансамблю квадраты обеих частей. В итоге получим $a_1^2(E) = a_2(E)$.

Предложенный способ описания неупругого процесса позволяет обойти решение задачи предельной сложности — прямое описание полного многофононного рассеяния.

3. Построим модель дисперсии рассеянной энергии с некоторыми основными свойствами отражения фононов на двумерных дефектах [1]: для любого вектора \mathbf{q} энергии $\hbar\omega_j(\mathbf{q})$ возбужденных фононов, поляризованных вдоль поверхности и нормально к ней, принимают значения соответственно в интервалах от 0 до Θ_n и от 0 до $\kappa\Theta_n$, где $\kappa \ll 1$; Θ_n — температура Дебая для поверхности. Закон дисперсии линейный.

Условие $\kappa \ll 1$ связано с тем, что отражательная способность двумерных дефектов слабо зависит от длины волны фонона λ вплоть до $\lambda > L$, где L — линейный размер искажения [1]. При $\kappa \ll 1$ ($\lambda \gg a$, где a — постоянная решетки) нормально поляризованные фононы слабо рассеиваются на дефекте и проходят в кристалл. В такой модели сохранение периодичности вдоль поверхности приводит к отводу и перераспределению большей части $E = E_1 - E_2$ вдоль поверхности (с динамикой гармонического приближения). После введения безразмерных величин

$$\varepsilon = E/\Theta_n, \quad \varepsilon_1 = E_1/\Theta_n, \quad \varepsilon_2 = E_2/\Theta_n, \quad t = T/\Theta_n, \quad \beta = k_2/k_1, \quad \tau = \tau'\Theta_n$$

перейдем в (2.1), (2.3) от суммы по \mathbf{q} к интегралу. С учетом κ -модели получим следующие выражения для интеграла в (1.1):

$$(3.1) \quad S = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i\varepsilon\tau} \langle e^{-iku(0)} e^{iku(\tau)} \rangle_T = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp\{iA_1 + A_2\}$$

и для $a_1(\kappa) = a_1/\Theta_n$, $a_2(\kappa) = a_2/\Theta_n^2$:

$$(3.2) \quad A_1 = -\tau\varepsilon + \frac{3}{\tau^2} \{e_t(\sin \tau - \tau \cos \tau) + e_n[\sin(\kappa\tau) - \kappa\tau \cos(\kappa\tau)]\};$$

$$(3.3) \quad A_2 = -\frac{3}{2}(e_t + \kappa^2 e_n) + \frac{3}{\tau^2} \{e_t(\cos \tau + \tau \sin \tau - 1) + e_n[\cos(\kappa\tau) +$$

$$+ \kappa\tau \sin(\kappa\tau) - 1]\} - 12 \left(e_t \int_0^1 + e_n \int_0^{\kappa} \right) \frac{dx x \sin^2(\tau x/2)}{\exp\{x/t\} - 1};$$

$$(3.4) \quad a_1(\kappa) = \varepsilon - e_t - \kappa^3 e_n,$$

$$a_2(\kappa) = \frac{3}{4}(e_t + \kappa^3 e_n) + 6 \left(e_t \int_0^1 + e_n \int_0^{\kappa} \right) \frac{x^3 dx}{\exp\{x/t\} - 1};$$

$$e_t = \varepsilon_1 \mu (\sin^2 \theta_1 + \beta^2 \sin^2 \theta_2 - 2\beta \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2));$$

$$e_n = \varepsilon_1 \mu (\cos \theta_1 + \beta \cos \theta_2)^2, \quad \varepsilon = \varepsilon_1 (1 - \beta^2),$$

где $e_n + e_t = e_0$ — приведенная энергия отдачи свободного центра; e_t и e_n — части e_0 , соответствующие касательному и нормальному изменениям импульса частицы; θ_1, φ_1 и θ_2, φ_2 — направления \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 в сферической системе координат, ось z которой совпадает с внешней нормалью к верхней плоскости узлов ($z=0$); $\theta_1 = \pi - \theta_1'$ — угол падения.

При $t=0$ интегралы в (3.3), (3.4) исчезают, а при $t > 1$

$$(3.5) \quad a_2(\kappa) = 2t(e_t + \kappa^3 e_n) + O((20t^2)^{-1}),$$

$$A_2 \approx -6t \left[e_t \left(1 - \frac{\sin \tau}{\tau} \right) + \kappa e_n \left(1 - \frac{\sin(\kappa\tau)}{\kappa\tau} \right) \right].$$

С помощью разложения (2.2) получены приближенные выражения для S

$$(3.6) \quad S = \begin{cases} \sqrt{2\pi/a_2(\kappa)} & \text{при } a_1(\kappa) = 0, \\ \sqrt{2\pi/2,718a_1^2(\kappa)} & \text{при } a_1^2(\kappa) = a_2(\kappa). \end{cases}$$

Переход от случая с подвижным центром к случаю с неподвижным происходит при $e_t + \kappa^3 e_n \gg t$. Выражения для S расходятся только при $\kappa = 0$; $\theta_2 = \theta_1$, $\pi - \theta_1$; $\varphi_1 = \varphi_2$ (см. фигуру).

В итоге результаты данной работы имеют вид

$$(3.7) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega_2} = (1 + \mu)^2 \sum_{\beta_i > 0} \beta_i |F(\kappa'(\beta_i); \kappa)|^2 S(\varepsilon(\beta_i); e_t(\beta_i); e_n(\beta_i); \kappa),$$

где $d\Omega_2 = \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2$; S определено выражениями (3.1)–(3.3), (3.5), (3.6), а β_i — корни уравнения

$$(3.8) \quad [\varepsilon(\beta) - e_t(\beta) - \kappa^3 e_n(\beta)]^2 = \frac{3}{4} [e_t(\beta) + \kappa^4 e_n(\beta)] + \\ + 6 \left(e_t \int_0^1 + e_n \int_0^\kappa \right) \frac{x^3 dx}{e^{x/t} - 1}.$$

Таким образом, задача рассеяния атома на кристалле сведена к задаче одночастичного рассеяния. После нормировки по оптической теореме выражение для плотности рассеянных частиц $P_2(\Omega_2) \sim \sum |F|^2 S$ позволяет получить различные характеристики однократного рассеяния.

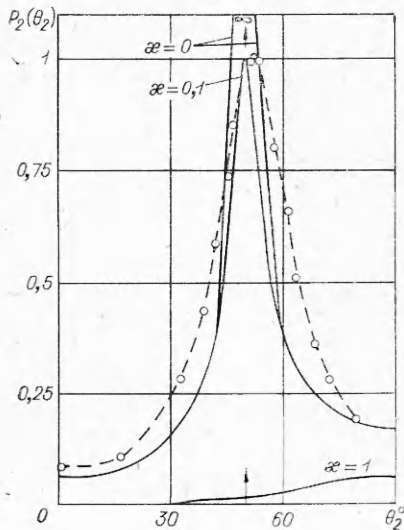
Результаты (3.7), (3.8) иллюстрируются рассеянием на жестких сферах. В этом случае $|F|^2 = \text{const}$ и угловая зависимость $P_2(\Omega_2)$ определена формфактором. На фигуре кривая $P_2(\theta_2, \kappa = 0,1)$ сравнивается с экспериментальной (ненормированной) диаграммой [4] для случая Ag/Ag , $E_1 = 2,56$ эВ, $T = 300^\circ\text{C}$, $\theta_1 = 50^\circ$, $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$. Для поверхности серебра $\Theta_n = 180$ К. Разный наклон кривых около поверхности связан с рассеянием на рельефе монокристаллов.

При $\kappa = 0$ энергия E перераспределяется только вдоль поверхности. При $\kappa = 1$ вид $P_2(\theta_2)$ соответствует вмо-
раживанию частиц (вид $P_2(\theta_2, T = 0, \kappa = 1)$ подобен виду $P_2(\theta_2, T \neq 0, \kappa = 1)$). Так как $\kappa = \kappa(T)$ и при $T \rightarrow 0$ происходит некоторое выравнивание связей в верхнем слое, то κ растет.

Величина κ определяется из экспериментальных зависимостей с насыщением, например, из $\Delta\theta_{2m}(E_1) = \theta_1 - \theta_{2m}(E_1)$ при $E_1 > 10$ эВ [5], где θ_{2m} — направление пика. Для жестких сфер получим

$$\kappa^3 = [(\sin \theta_{2m} - \sin \theta_1) \cos \theta_{2m}] / [\cos \theta_{2m} + \sin \theta_{2m}].$$

При $\kappa \ll 1$ и любых E_1 $\theta_{2m} \approx \theta_1$ только для жестких сфер и при переходе к более мягким потенциалам $\Delta\theta_{2m}$



становится функцией от E_1 . С увеличением E_1 происходит сужение $P_2(\theta_2)$, наблюдаемое в [5].

Отметим, что при $E_1 < 0,1$ эВ в квантовой постановке задача исследована для упругого и однофононного рассеяния на одномерном потенциале — стенке [6]. При $E_1 > 0,1$ эВ модельных разработок сделано мало [7]. Для этих энергий более распространены классические модели. В этих моделях считается, что при $k_1 a \gg 1$ только кратно-рассеянные частицы воспроизводят пиковое отражение на стенке [8].

Однако вкладу частиц, испытавших надбарьерное рассеяние в кристалл и кратное перемешивание в нем, соответствует слабая зависимость пика от θ_1 [9]. Формирование такого пика наблюдается лишь в интервале 100—400 эВ для E_1 [9]. Поэтому при $E_1 < 100$ эВ вероятнее растворение газа в кристалле, которое сопровождается диффузией частиц на поверхность и диффузной десорбцией их с $\langle E_2 \rangle \ll E_1$. Рассеяние на рельефе также приводит к диффузному рассеянию.

В серии экспериментов последних десяти лет показано, что отражение атомов благородных газов с E_1 до 100 эВ на контролируемых поверхностях простых монокристаллов имеет однопиковый квазизеркальный характер [4, 5, 9]. В данной работе наблюдаемый вид отражения получен для однократных столкновений и сделано предположение о связи квазизеркального рассеяния со спецификой отдачи поверхностных центров. Полученные результаты позволяют предположить, что при $E_1 < 100$ эВ возможно разделение шума (вклада в $P_2(\Omega_2)$ кратных физически не наблюдаемых столкновений) от вклада однократно-отраженных частиц, несущих информацию о динамике и структуре поверхности и о взаимодействии атома с кристаллом.

Автор выражает благодарность за полезное обсуждение А. З. Паташинскому, А. В. Чаплику, И. А. Гиляинскому, Ю. Д. Нагорных и за помощь в работе А. М. Седелникову.

Поступила 25 XI 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Ziman J. M. Electrons and phonons. Oxford, 1960, Рус. пер. Займан Дж. Электроны и фононы. М., ИЛ, 1962.
2. Иванов Г. К., Саясов Ю. С. Теория рассеяния в импульсном приближении. — ЖЭТФ, 1963, т. 45, с. 1456.
3. Goldberger M. L., Watson K. M. Collision theory. N. Y., 1964. Рус. пер. Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. М., «Мир», 1967.
4. Romney M. J., Anderson J. B. Scattering of 0,05—5 ev argon from the (111) plane of silver. — J. Chem. Phys., 1969, vol. 51, p. 2492.
5. Liu S. M., Rodgers W. E., Knuth E. L. Transition between atom-surface scattering. — In: Rarefied Gas Dynamics. Proc. IX Intern. Sympos. Vol. II. N. Y.—L., Academic Press, 1974.
6. Goodman F. O. Quantum-mechanical treatment of the one-phonon inelastic scattering of gas atoms in three dimensions by a simplified continuum model of a solid. — «Surface Sci.», 1972, vol. 30.
7. Богданов А. В., Сергеев В. Л. Индикатриса рассеяния атома газа на кристаллической поверхности в эйкональном приближении. — В кн.: Аэродинамика разреженных газов. Вып. 7. Л., изд. Ленингр. ун-та, 1974.
8. Пярниту А. А. Взаимодействие молекул газа с поверхностями. М., «Наука», 1974.
9. Devienne F. M., Souquet J., Roustan J. C. Study of the scattering of high energy molecules by various surfaces. — In: Rarefied Gas Dynamics. Proc. III. Intern. Sympos. Vol. II. N. Y., 1966.