

VCH-FC
DOC-F
L177

Scattering Inelástico de Átomos por Superficies

Tesis

Entregada a la

Universidad de Chile

en cumplimiento parcial de los requisitos

para optar al grado de

Doctor en Ciencias con Mención en Física

Facultad de Ciencias

1975

por

Miguel A. Lagos Infante

Patrocinante: Dr. Lipo Birstein Furer

Facultad de Ciencias
Universidad de Chile
Sede Santiago-Oriente

I N F O R M E D E A P R O B A C I O N
T E S I S D E D O C T O R A D O

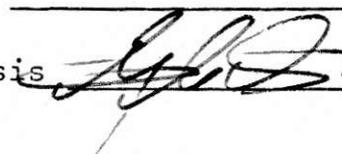
Se informa a la Comisión de Doctorado de la
Facultad de Ciencias que la Tesis de Docto-
rado presentada por el Candidato

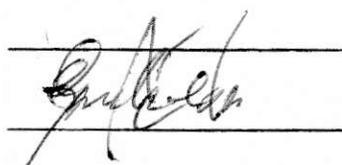
Miguel A. Lagos Infante

ha sido aprobada por la Comisión Informante
de Tesis como requisito de tesis para el
grado de Doctor en Ciencias con Mención en
Física, en el Examen de Defensa de Tesis
rendido el día

Patrocinante de Tesis

Comisión Informante de Tesis





FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD DE CHILE

SEDE SANTIAGO-ORIENTE

INFORME DE APROBACION

TESIS DE DOCTORADO

Se informa a la Comisión de Doctorado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Doctorado presentada por el Candidato :

MIGUEL ANGEL LAGOS INFANTE

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito de Tesis para el grado de Doctor en Ciencias con Mención en FÍSICA , en el Examen de Defensa de Tesis rendido el día 27 de Octubre de 1975.

Patrocinante de Tesis: Dr. Lipo Birstein

Dr. Francisco Claro
Comisión Informante de Tesis

Dr. Guillermo Cabrera
Comisión Informante de Tesis

Dr. Peter Kuri
Comisión Informante de Tesis

Dr. Carlos López
Comisión Informante de Tesis

Dr. Luis Sepúlveda
Comisión Informante de Tesis

Handwritten signatures of the thesis committee members over horizontal lines. From top to bottom: Lipo Birstein, Francisco Claro, Guillermo Cabrera, Peter Kuri, Carlos López, and Luis Sepúlveda.

He dedicado este trabajo a María Soledad,
mi esposa, y a mis padres

AGRADECIMIENTOS

Deseo agradecer al Dr. Lipo Birstein por la valiosa ayuda prestada al desarrollo de este trabajo. También estoy muy reconocido al Dr. Alberto Filevich, bajo cuya tutoría comencé mis estudios de doctorado; al Lic. Jaime Roessler, por las útiles conversaciones que tuve con él acerca del tema de esta tesis y, en general, al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile.

Debo, asimismo, expresar mi agradecimiento a la Comisión Chilena de Energía Nuclear por el apoyo que brindó a los trabajos que se exponen en esta tesis.

INDICE DE MATERIAS

	Resumen	vi
1.	Introducción	1
2.	Las ecuaciones de scattering	16
3.	Los elementos de matriz	24
	3.1 La aproximación de 1-fonón	32
4.	Solución en aproximación de 1-fonón	38
	4.1 Las ecuaciones de scattering en apro- ximación de 1-fonón	38
	4.2 Solución inhomogénea en aproximación de 1-fonón	39
	4.3 Integración sobre k_z en el límite $z \rightarrow \infty$	42
	4.4 Integración sobre z'	44
	4.5 La sección eficaz diferencial para scattering inelástico	50
5.	Criterio para la aproximación de 1-fonón y términos de corrección	55
	5.1 La solución inhomogénea	61
6.	Comparación con resultados experimentales.	64
	6.1 Rotación del blanco	72
	6.2 El experimento de Boato, Cantini y Mattera	79

LISTA DE FIGURAS Y TABLAS

Figura 1	Scattering de Ne por LiF (001)	8
Figura 2	Scattering de He por W (112)	10
Figura 3	Scattering de He sobre Ag (111)	12
Figura 4	Scattering de He sobre LiF (100)	14
Figura 5	Trayectoria de integración para evaluar la integral (4.16)	43
Figura 6	Scattering de He por LiF (100) en las cercanías del pico especular	70
Figura 7	Diagrama de Ewald para rotación φ del blanco	74
Figura 8	Datos experimentales de B. Williams comparados con predicciones de $\theta_r + \Delta$ para varios valores de α	77
Tabla 1	Algunos valores de θ_r en función de α y φ	80

Nota

Se ha tomado la palabra "scattering" directamente del inglés, sin ningún intento por traducirla al castellano. La razón de esto es la falta de equivalencia con una palabra española adecuada. En algunos textos se la traduce por "dispersión", pero esta palabra designa un fenómeno físico distinto, que interviene en el texto de la tesis, y luego no puede ser empleado aquí.

Asimismo, se ha usado un anglicismo inaceptable desde el punto de vista del idioma, como es la palabra "scatterreado". Defendemos el uso de este vocablo por su corriente uso oral y por la necesidad de las formas verbales derivadas de la palabra "scattering".

RESUMEN

Una buena forma de estudiar la estructura y dinámica superficial de sólidos es mediante scattering de átomos a energías en el rango térmico. Este rango de energía incidente asegura que el haz tiene penetración nula y los resultados observados provienen de la interacción con la primera capa monoatómica del sólido. Sin embargo, si bien las técnicas experimentales han alcanzado un buen grado de desarrollo, el problema teórico de las colisiones gas-superficie ha sido resuelto sólo para las componentes elásticas. No existiendo una buena teoría que considere las intensidades de scattering inelástico, gran parte de la información contenida en resultados experimentales no ha sido aún extraída (potenciales de interacción, relaciones de dispersión de fonones superficiales, etc.).

En este trabajo se presenta una solución para scattering inelástico considerando solamente colisiones con intercambio de un fonón. Se desarrolla tam-

bién un criterio para decidir cuando esta aproximación es aplicable y se calculan términos de corrección para scattering de muchos fonones, para los casos en que estos sean necesarios.

El problema es tratado con todo rigor físico, de modo de proveer una teoría confiable para el análisis de datos experimentales. Se obtiene una expresión para la sección eficaz diferencial en función de un potencial general, considerando un modelo real muy general para el sólido.

La sección eficaz diferencial para el sistema He-LiF fue calculada usando parámetros estimados por otros métodos. El acuerdo de los datos calculados con valores obtenidos experimentalmente por otros autores es excelente.

1. INTRODUCCIÓN

El scattering de átomos a energías en el rango térmico por superficies sólidas está llegando a constituir una útil herramienta para el estudio de la estructura y dinámica de superficies.

Estermann, Frisch y Stern (1-5) fueron los primeros que reportaron experimentos de scattering atómico por superficies monocristalinas. Su interés, sin embargo, no era estudiar la superficie, sino probar el comportamiento ondulatorio del haz. La época en que estos experimentos fueron realizados (alrededor de 1930, en la alborada de la Mecánica Cuántica) explica el objetivo de los autores. Estos hicieron incidir haces térmicos bien colimados de H_2 y He sobre superficies limpias de NaCl y LiF, detectando las intensidades scattereadas mediante un manómetro de alto vacío. El éxito obtenido al observar un espectro de difracción de las mismas características del esperado al considerar la red superficial como una red de reflexión, no impidió que esta técnica fuera luego prácticamente abandonada hasta la década de 1960. En esos años, el fuerte interés por el estudio de la superficie de los sólidos que hoy se observa comenzaba a nacer. Sin

embargo los progresos realmente significativos en scattering atómico, ya sean éstos en las técnicas experimentales o en la teoría del fenómeno, comienzan a aparecer alrededor del año 1969 y en la actualidad este método no ha superado completamente aún su etapa de desarrollo.

La razón de esta demora estriba principalmente en los numerosos problemas experimentales que hacen de esta técnica un método "difícil". La limpieza del blanco es un factor crítico; en efecto, dado que el haz atómico tiene penetración nula, basta la existencia de una capa monoatómica adsorbida por la superficie blanco para anular toda posibilidad de ver nada de interés. Técnicas de ultra-vacío deben ser empleadas para obtener una presión de 10^{-9} torr en la cámara del blanco. Esto permite conservar la limpieza de la superficie durante un tiempo razonable para trabajar. Muchas veces es necesario mantener control sobre la composición química o la estructura de la superficie, lo primero se consigue usando espectrometría auger en forma simultánea, mientras lo segundo puede obtenerse anexando al sistema experimental un monitor de difracción de electrones de baja energía. Muchos problemas

nacen del hecho de que un haz de átomos neutros no es tan fácil de manipular como uno de partículas cargadas, ya sea para su producción como para su detección. Los haces producidos por toberas (nozzle beams), generados por una cámara con gas a alta presión de la cual el gas escapa por un agujero de algunas milésimas de pulgada de diámetro, expandiéndose en el vacío, constituyen una buena solución por su intensidad y relativamente buena resolución en energía (menor a 10% de dispersión en velocidades (6)). Respecto de los sistemas de detección, los más usados de éstos funcionan en forma análoga a manómetros de ionización, técnica ésta de uso corriente en alto vacío; Haberrecker et al. (7) consiguieron, sin embargo, desarrollar un detector de átomos neutros de estado sólido, desafortunadamente su utilidad está restringida a átomos de hidrógeno y oxígeno.

Si bien las técnicas experimentales de scattering atómico han adquirido en los últimos años un desarrollo que puede considerarse adecuado, no ocurre así con la teoría del fenómeno de colisión, necesaria para relacionar las observaciones con las magnitudes físicas que se desea conocer. A. Tsuchida (8), Cabrera

Celli, Goodman y Manson* (9) y recientemente Garibaldi et al. (10) se han ocupado del problema de scattering elástico de átomos por superficies, consiguiendo grandes avances en su solución general. La teoría de CCGM es válida cuando la componente de scattering inelástico es despreciable frente a la componente elástica. Hábilmente estos autores desarrollaron las funciones que intervienen en la ecuación de Schrodinger del sistema en vectores de la red recíproca superficial; dado que para energías incidentes en el rango térmico el espectro de difracción tiene un número finito de haces difractados, sólo un número finito y definido de vectores recíprocos darán contribución no nula. Esto permite a CCGM obtener un sistema de ecuaciones algebraicas acotado para la matriz de transición.

La teoría de CCGM para scattering elástico plantea la ecuación de Schrodinger para un potencial que es el valor esperado del potencial de interacción entre el átomo incidente y la superficie. Es decir, supone que la partícula incidente sólo es capaz de

* El trabajo de Cabrera et al. (9) sera llamado por CCGM.

"ver" el potencial promediado a través de todos los átomos de la superficie. Obtienen de ese modo una gran simplificación teórica. En el presente trabajo se demuestra que la suposición de CCGM es rigurosamente válida, poniendo sobre bases más sólidas esa teoría.

La solución obtenida por Garibaldi et al. para la componente elástica tiene el mérito de mostrar una explicación cuántica muy directa del fenómeno de "rainbow scattering", pero es, sin duda, de menor generalidad que la solución de CCGM, la cual se presenta en función de un potencial generalizado. La solución inelástica de Garibaldi et al. es también de menor generalidad que la presentada en las páginas que siguen por análoga razón.

Una gran cantidad de trabajos publicados en los últimos años (9-13), mostrando tentativas de solución para el problema de scattering atómico inelástico, da prueba del interés que despierta tal solución. Sin embargo no se ha conseguido aún ese objetivo. La razón para establecer esto es la siguiente: el interés de los experimentos de scattering inelástico de átomos reside en la obtención de los potenciales de interac-

ción gas-superficie y en el estudio de la dinámica superficial a nivel microscópico. Las teorías aparecidas en la literatura se basan en potenciales de interacción simples y dados a priori y en modelos del sólido simplificados y no reales. Los datos experimentales en scattering inelástico de átomos están actualmente, por esa causa, separados de las magnitudes físicas importantes que contienen.

En el presente trabajo se propone una solución para scattering inelástico basada en un modelo muy general del sólido y en un potencial de interacción gas-superficie consistente en una suma de potenciales de 2 cuerpos. El potencial de 2 cuerpos es completamente general; por razones de simplicidad se lo considera central, pero la solución puede generalizarse para potenciales no centrales en forma directa. La solución que se propone considera solamente colisiones con intercambio de cero o un fonón, dándose un criterio para resolver cuando esta aproximación es lícita y términos de corrección para los casos en que estos sean necesarios. Esta teoría se complementa con la de CCGM y forma con ella un conjunto autoconsistente.

En el capítulo 6 se predice, basado en razones puramente cinemáticas, que, si los fonones superficiales contribuyen en forma predominante al scattering inelástico y las condiciones son tales que vale la aproximación de colisiones de un fonón, al efectuar una ligera rotación del cristal (sacando la normal a la superficie del plano del detector y el haz incidente) aparece una zona prohibida para la intensidad inelástica en torno de los picos de difracción. Este efecto, no reportado anteriormente, es muy interesante pues la ubicación de aquellos puntos que bordean esas zonas prohibidas (de fácil medición) dependen sólo de la velocidad del sonido superficial, constituyendo un método relativamente sencillo y exacto de obtener esa magnitud.

Para finalizar esta introducción, y con el objeto de que el lector no familiarizado con esta técnica experimental adquiriera una visión general de ella, se mostrarán algunos resultados experimentales representativos.

La figura 1 muestra resultados no publicados obtenidos en 1974 por Boato, Cantini y Mattera. El blanco de LiF, mantenido a una temperatura de 80K, pro-

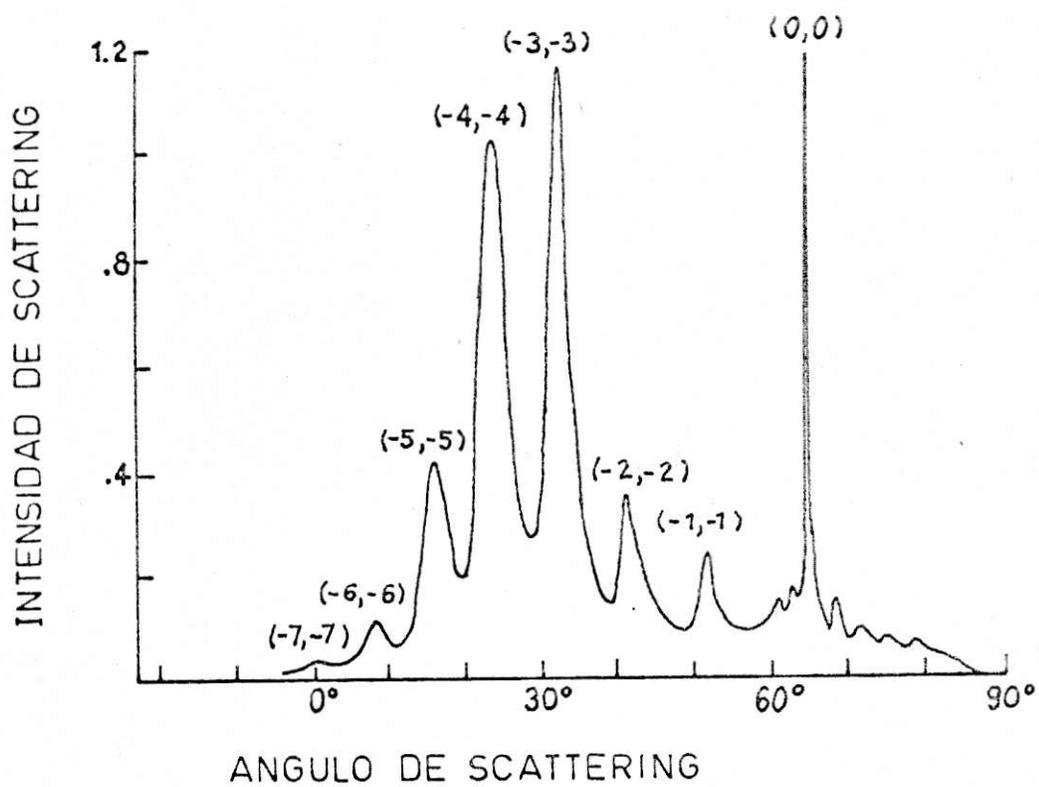


Figura 1. Scattering de Ne por LiF (001).
(No publicado).

senta la superficie (001) al haz de Ne. Este es generado por una tobera (nozzle beam) e incide formando un ángulo $\theta_i = 65^\circ$ con la normal a la superficie. El detector se mueve en el plano de incidencia (el plano de la normal y el haz incidente), definido en este caso por la dirección $\langle 100 \rangle$.

Los picos elásticos (o picos de difracción) son indicados en la figura por los vectores recíprocos correspondientes. Sus ubicaciones angulares son fácilmente predecibles si se conoce el parámetro de la red superficial. El máximo en $\theta = \theta_i$, correspondiente al vector recíproco (0,0), es denominado pico especular; su forma no es afectada por la dispersión en energía del haz incidente, de modo que constituye un buen indicador de la dispersión angular del sistema experimental. Los máximos pequeños que se observan en torno del pico especular no corresponden a línea de difracción alguna y son atribuidos a colisiones inelásticas, estas intensidades serán discutidas en el capítulo

La figura 2 corresponde a mediciones de scattering de He por W(112), realizadas en 1973 por Stoll y Merrill (14). El ancho de los picos elásticos se debe a que en este experimento se empleó un haz tér-

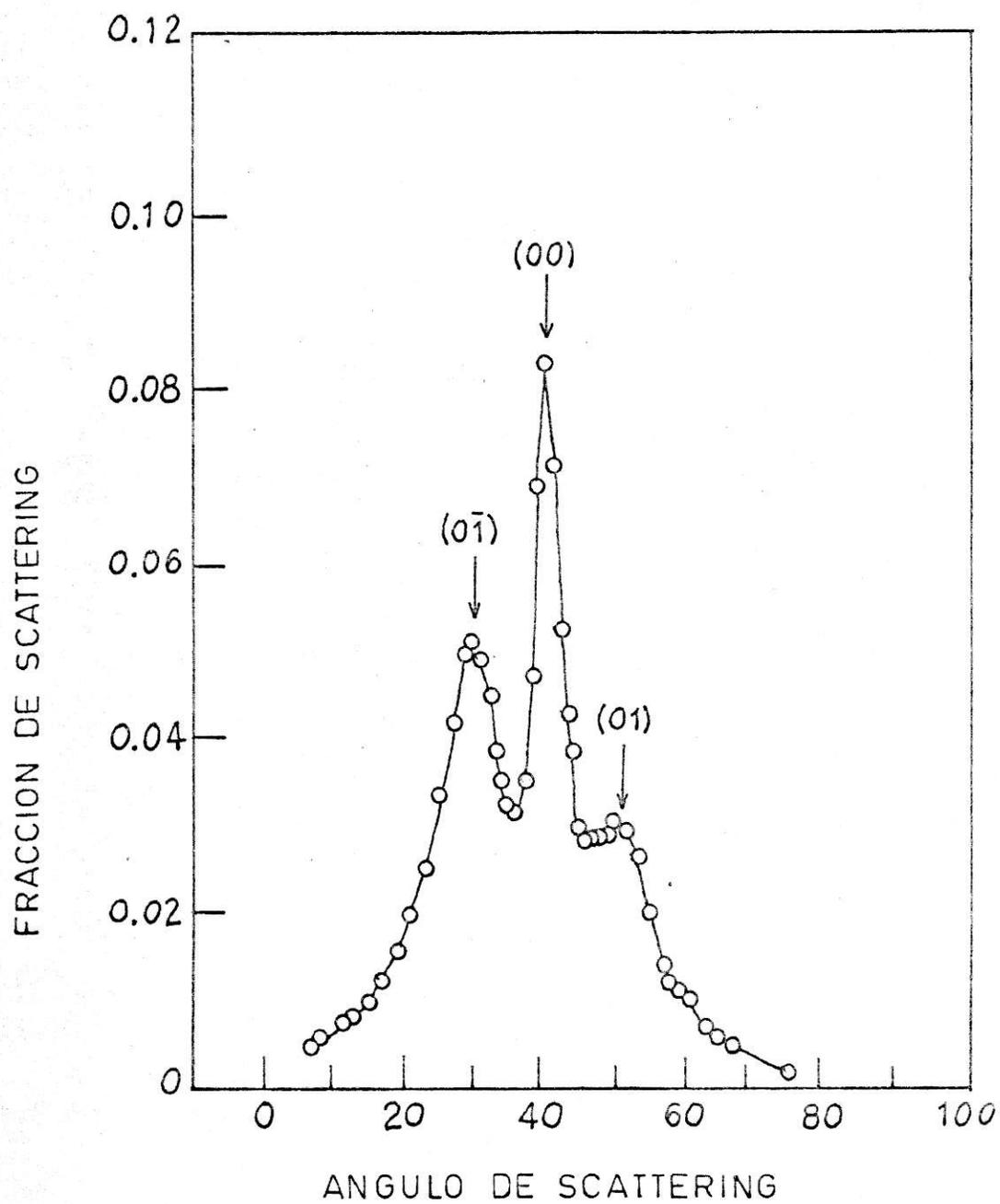


Figura 2. Scattering de He por W(112). (14).

mico, a temperatura $T_b = 300$ K. El plano de incidencia es el plano definido por la normal y la dirección cristalográfica $\langle 110 \rangle$.

La superficie blanco en este experimento fue controlada por difracción de electrones de baja energía y por espectroscopía Auger. Este control fue necesario debido a la alta temperatura del blanco requerida para mantener la limpieza de la superficie (alrededor de 1300 K), que hacía sospechar la formación de una capa de carburo de tungsteno. Esta no fue observada, confirmando así la validez de los resultados de Tendulkar y Stickney (15), que fueron los primeros en observar difracción por superficies de tungsteno en 1971. Con excepción del W, jamás se ha conseguido obtener un diagrama de difracción con blancos metálicos. Una discusión acerca de las razones de este comportamiento se da en un trabajo reciente de Garibaldi et al. (10).

Otro ejemplo de scattering atómico sobre una superficie metálica es mostrado en la figura 3. Se trata de los resultados obtenidos por Subbarao y Miller (16) al hacer incidir un haz de He sobre Ag (111). El ángulo de incidencia es $\theta_i = 75^\circ$ y sólo se observa el

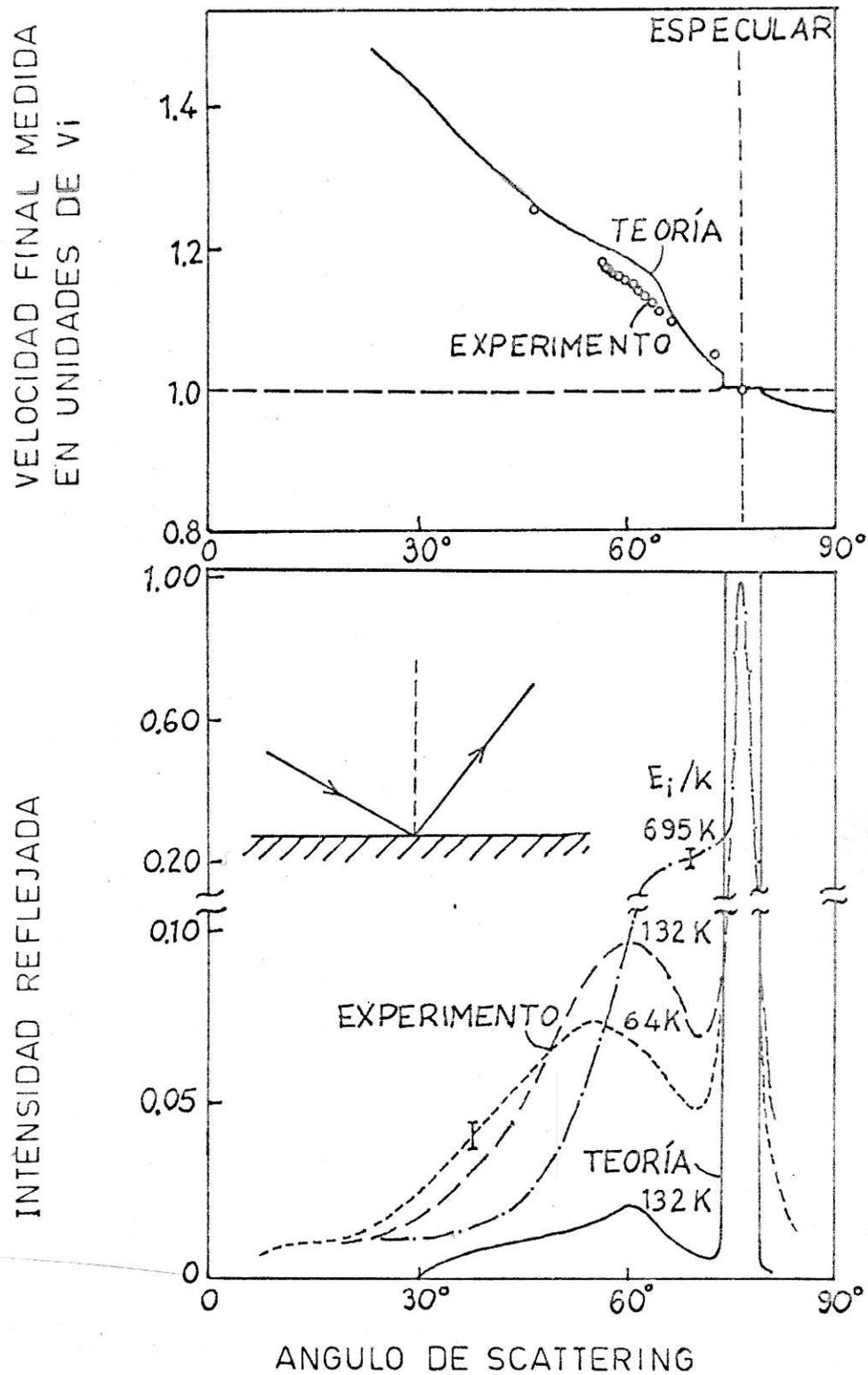


Figura 3. Scattering de He sobre Ag(111).
(17,16).

pico especular acompañado de un ancho lóbulo de origen inelástico, el que crece al aumentar la energía del haz incidente. La curva de trazo continuo fue obtenida teóricamente por Goodman (17). Este realiza los cálculos en primer orden y luego generaliza los resultados para hacerlos unitarios. El tratamiento del problema es de poco rigor físico y se hacen fuertes simplificaciones. A pesar de eso, se obtiene un resultado que explica cualitativamente el fenómeno, no pudiéndose decir lo mismo del aspecto cuantitativo.

El diagrama superior de la figura 3 muestra las velocidades de los átomos scattereados en función del ángulo de scattering, tanto para los valores medidos por Subbarao y Miller como para la predicción teórica de Goodman.

En el capítulo 6 serán usadas las mediciones de B. Williams (18) de scattering de He sobre LiF (100) para comparar con resultados teóricos. La figura 4 adelanta algunas de las curvas experimentales obtenidas por Williams. Conviene notar que en estos gráficos el eje de abcisas fue dibujado parcialmente, apareciendo en ellos sólo las zonas vecinas al pico especular ($\theta_i = 65^\circ$). El gráfico (a) muestra la base

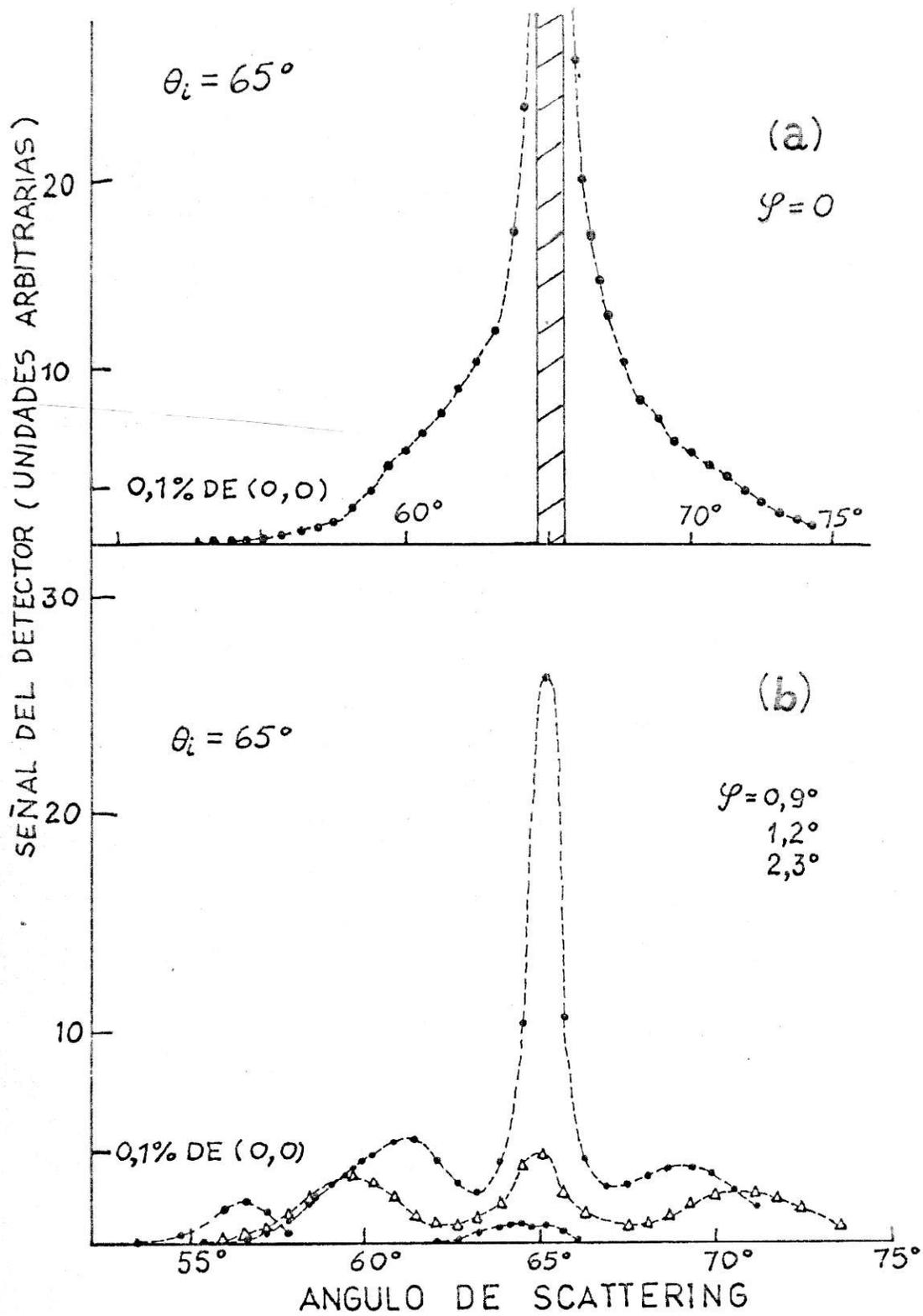


Figura 4. Scattering de He sobre LiF(100). (18).

del pico (0,0), la que aparece ensanchada por débiles intensidades inelásticas. El plano de incidencia es definido por la normal y la dirección $\langle 100 \rangle$. El haz, producido por tobera, tiene una energía de 58 meV y la temperatura del blanco es de 150 K. La resolución angular del sistema es excelente: $0,6^\circ$ de ancho total a mitad de la altura y $1,0^\circ$ de ancho total en la base. Williams pudo observar, de este modo, 13 picos de difracción perfectamente resueltos.

En la figura 4(b) pueden verse los resultados de medir después de efectuar una ligera rotación del cristal en torno de la dirección $\langle 100 \rangle$. En esta forma el intenso pico elástico queda fuera del ángulo sólido subtendido por el detector y las intensidades inelásticas son observadas con toda claridad.

El contenido de los capítulos 2, 3, 4 y parte del capítulo 6 constituye el tema de la referencia (19). El capítulo 5 será publicado de acuerdo a la referencia (20) y la sección 6.1 corresponde a la referencia (21).

2. LAS ECUACIONES DE SCATTERING

Se considerará primeramente un blanco monoatómico formado por N átomos de masa M , sobre el que incide un átomo neutro de masa m con momentum bien definido.

El potencial de interacción entre la partícula incidente y el blanco se supone un superposición de potenciales de 2 cuerpos dependientes de la distancia. Es decir, si \vec{r} denota la posición del átomo incidente y \vec{r}_k designa el vector posición del átomo del blanco cuya posición de equilibrio es \vec{r}_k , el potencial será de la forma:

$$V(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_k V(|\vec{r} - \vec{r}_k|) \quad . \quad (2.1)$$

El Hamiltoniano del sistema total es entonces

$$H = \frac{p^2}{2m} + H_S + V(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad , \quad (2.2)$$

en donde $\frac{p^2}{2m}$ es el operador de energía cinética del átomo incidente, H_S es el Hamiltoniano de las N partículas que componen el blanco y V es el término de interacción discutido antes.

El sistema, en rigor, no es aislado pues el blanco está en equilibrio térmico con un foco calorífico a temperatura T_s . Se supondrá primero que el sistema es aislado y que el estado inicial del blanco (cuando aún no experimenta la interacción con la partícula del haz) es un autoestado de H_s . Las probabilidades de transición obtenidas bajo esa suposición se promediarán de acuerdo al ensemble canónico, para introducir la interacción con el foco. Establecer que el sistema es aislado equivale a poner

$$H|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle \quad , \quad (2.3)$$

en donde $|\varphi\rangle$ es un autoestado de energía λ del sistema total.

Se llamará a los autoestados y autovalores del Hamiltoniano del blanco $|n\rangle$ y ϵ_n respectivamente, de modo que

$$H_s|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle \quad , \quad (2.4)$$

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \quad . \quad (2.4')$$

Se supone, por simplicidad, que los estados $|n\rangle$ no son

degenerados.

Una manera conveniente de trabajar con la ecuación (2.3) es usar representación de coordenadas para las variables relacionadas con la partícula del haz, se escribirá

$$H|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \quad , \quad (2.5)$$

en donde

$$|\phi\rangle \equiv \langle \vec{r} | \varphi \rangle \quad (2.6)$$

es un vector del espacio de Hilbert generado por el conjunto de los autovectores $|n\rangle$ de H_S . Luego, $|\phi\rangle$ puede ser expresada

$$|\phi\rangle = \sum_{n'} \psi_{n'}(\vec{r}) |n'\rangle \quad . \quad (2.7)$$

De la forma de este desarrollo se desprende que $|\psi_{n'}(\vec{r})|^2$ es la densidad de probabilidad de encontrar al blanco en el estado de energía $\epsilon_{n'}$, y al átomo de gas en \vec{r} con energía $\lambda - \epsilon_{n'}$, cuando es realizada una medición de esas variables en forma simultánea. La ecuación (2.3) en representación $-\vec{r}$ toma la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + H_0 + V(\vec{r}, \vec{r}_2)\right]|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle. \quad (2.8)$$

Introduciendo la expansión (2.7) en la ecuación (2.8), se obtiene la ecuación para los coeficientes $\psi_n(\vec{r})$

$$(\nabla^2 + k_{n'}^2)\psi_{n'}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_m \langle n'|V(\vec{r}, \vec{r}_2)|m\rangle \psi_m(\vec{r}), \quad (2.9)$$

con $k_{n'}$ definido de modo que

$$\lambda - \epsilon_{n'} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{n'}^2. \quad (2.10)$$

Si el término de índice $m = n'$ de la suma que figura en el segundo miembro de (2.9) se lleva al primer miembro, se obtiene la ecuación

$$\left(\nabla^2 + k_{n'}^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \langle n'|V|n'\rangle\right)\psi_{n'} = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{m \neq n'} \langle n'|V|m\rangle \psi_m, \quad (2.11)$$

válida para todos los índices n' .

En el segundo miembro de la ecuación (2.11) no interviene explícitamente la función $\psi_{n'}$, luego las soluciones deben ser de la forma.

$$\psi_{n'}(\vec{r}) = c_{n'} \psi_{n'}^H(\vec{r}) + \psi_{n'}^I(\vec{r}) \quad , \quad (2.12)$$

en donde $\psi_{n'}^I$, es una solución particular de (2.11) y $\psi_{n'}^H$, solución general de la ecuación homogénea

$$(\nabla^2 + k_{n'}^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \langle n'|V|n'\rangle) \psi_{n'}^H = 0 \quad . \quad (2.13)$$

En la ecuación (2.13) no hay dependencia (explícita ni implícita) de estados del blanco distintos del estado $|n'\rangle$, por lo tanto la solución homogénea $\psi_{n'}^H$, no puede contener información acerca de transiciones del blanco provocados por la colisión. Se deduce, entonces, que la componente $\psi_{n'}^H$, describe solamente colisiones elásticas.

Es importante observar que la ecuación homogénea es de la misma forma de la ecuación (2.2) del trabajo CCGM, salvo que en esta última el elemento de matriz ha sido promediado térmicamente. Se demostrará en el capítulo 3, que el promedio térmico no constituye una diferencia importante, pues, en las condiciones en que la aproximación de colisiones de un

fonón es válida, los elementos de matriz diagonales del potencial $\langle m|v|m\rangle$ no dependen de m . Por esta razón el promedio según el ensemble equivale al promedio cuántico. De todos modos, independientemente de estas consideraciones, la ecuación (2.13) es susceptible de ser resuelta mediante el método desarrollado por CCGM, al menos asintóticamente.

Se introducirán a continuación las condiciones de borde del problema, con el fin de obtener las constantes C_n , y el significado físico de las componentes de la solución. Antes de la colisión y a distancia infinita del blanco, el átomo incidente tiene energía bien definida

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad (2.14)$$

y vector de onda \vec{k}_n . El estado inicial del blanco será $|n\rangle$, autovector de energía ϵ_n de H_S . La energía total del sistema es entonces $\lambda = E_n + \epsilon_n$. Esta notación será dada por entendida en todo lo que sigue.

Para los vectores se usará la notación introducida por CCGM: Los vectores tridimensionales son denotados por letras minúsculas. El vector bidimensional correspondiente, paralelo a la superficie es designado por la

correspondiente letra mayúscula; la componente según OZ, perpendicular a la superficie, se denota por la letra minúscula respectiva acompañada del subíndice z . La única excepción la constituye el vector \vec{n} , cuya componente normal se escribe simplemente z .

Consideremos la solución general (2.12) para $n' \neq n$.

De acuerdo a CCGM, la función $\psi_{n'}^H$, es, en el límite asintótico $z \rightarrow \infty$, función de onda de una partícula libre de energía

$$E_{n'} = \frac{\hbar^2 k_{n'}^2}{2m} \quad . \quad (2.15)$$

Entonces, dado que se demostró que $\psi_{n'}^H$ puede describir solamente a partículas scattereadas elásticamente, y que es $E_n \neq E_{n'}$, la única forma de ser consistentes con la hipótesis de energía incidente E_n es poniendo $C_{n'} = 0$ para todo $n' \neq n$.

Luego, la solución general del problema es de la forma

$$\psi_{n'} = \delta_{nn'} \psi_{n'}^H + \psi_{n'}^I \quad . \quad (2.16)$$

De este modo, las soluciones físicamente aceptables de

la ecuación (2.13) resultan ser no triviales sólo para $n' = n$, estando la parte inelástica contenida íntegramente en la solución inhomogénea $\psi_{n'}^I$.

Este resultado, junto con el hecho de que la ecuación planteada por CCGM para scattering puramente elástico (aproximación de cero fonón) es equivalente a la ecuación homogénea (2.13), constituye una demostración formal del punto de partida postulado por esos autores. La ecuación (2.16) establece también una independencia formal de los problemas de scattering elástico e inelástico. En efecto, la componente elástica es determinada por la ecuación homogénea, cuya solución no requiere del conocimiento de las funciones $\psi_{n'}^I$. El cálculo de estas últimas constituye el problema que se aborda en las páginas que siguen.

3. LOS ELEMENTOS DE MATRIZ

Si se considera la interacción fonón-fonón despreciable, los elementos de matriz $\langle n|v|m\rangle$, que figuran en las ecuaciones de scattering, pueden ser calculados en forma exacta. Para ese fin el potencial de dos cuerpos se expresará desarrollando en integral de Fourier

$$V(|\vec{r} - \vec{r}'|) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\vec{p} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r} - \vec{r}')} V(\vec{p}), \quad (3.1)$$

en donde se ha definido

$$V(\vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\vec{\xi} e^{i\vec{\xi}\cdot\vec{p}} V(|\vec{\xi}|). \quad (3.2)$$

El elemento de matriz que se busca queda entonces expresado por

$$\begin{aligned} \langle n|V(\vec{r}, \vec{r}')|m\rangle &= \\ &= (2\pi)^{-3/2} \sum_{\vec{l}} \int d^3\vec{p} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} V(\vec{p}) \langle n|e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}'}|m\rangle. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Procediendo en esta forma, el problema de evaluar el

elemento de matriz para un potencial general (sujeto a la condición de existencia de su transformada de Fourier) se reduce a calcular $\langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}_{\vec{l}}} | m \rangle$.

Para un sólido monoatómico, en la aproximación de interacción fonón-fonón despreciable, el operador de posición del átomo de la celda \vec{l} es (22)

$$\vec{r}_{\vec{l}} = \vec{l} + \sum_{\lambda} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_{\lambda}} \right)^{1/2} \hat{A}_{\lambda} (a_{\lambda} e^{i\vec{q} \cdot \vec{l}} + a_{\lambda}^{\dagger} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{l}}); \quad (3.4)$$

en donde \vec{q} es el pseudo-momentum del fonón; los índices λ , que caracterizan los fonones, son dados por $\lambda = (\mu, \vec{q})$, μ indica la rama del fonón; a_{λ} y a_{λ}^{\dagger} son los operadores de creación y aniquilación de un fonón $-\lambda$, respectivamente. El símbolo ω_{λ} denota la frecuencia del fonón- λ y \hat{A}_{λ} es su vector unitario de polarización. El autoestado $|n\rangle$ de H_S es

$$|n\rangle = |n_{\lambda_1} \dots n_{\lambda_N}\rangle = \prod_{\lambda} \frac{(a_{\lambda}^{\dagger})^{n_{\lambda}}}{\sqrt{n_{\lambda}!}} |0\rangle, \quad (3.5)$$

en donde n_{λ} designa el número de fonones- λ . La energía correspondiente a este estado es dada por

$$\epsilon = \sum_{\lambda} (n_{\lambda} + 1/2) \hbar \omega_{\lambda} \quad . \quad (3.6)$$

Con estas hipótesis se evaluará el elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} | m \rangle &= \\ &= \langle n | \exp \left\{ i\vec{p} \cdot \left[\vec{r} + \sum_{\lambda} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_{\lambda}} \right)^{1/2} \hat{A}_{\lambda} (a_{\lambda} e^{i\vec{q}_{\lambda} \cdot \vec{r}} + a_{\lambda}^{\dagger} e^{-i\vec{q}_{\lambda} \cdot \vec{r}}) \right] \right\} | m \rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

Con el fin de simplificar la notación se escribirá

$$D_{\lambda} \equiv \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_{\lambda}} \right)^{1/2} (\vec{p} \cdot \hat{A}_{\lambda}) e^{i\vec{q}_{\lambda} \cdot \vec{r}} ; \quad (3.8)$$

con lo que la expresión (3.7) queda

$$\langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} | m \rangle = e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \langle n | \exp \left\{ i \sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^{\dagger} + i \sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda} \right\} | m \rangle . \quad (3.9)$$

El conmutador

$$\left[i \sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^{\dagger}, i \sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda} \right] = - \sum_{\lambda \lambda'} D_{\lambda}^* D_{\lambda'} [a_{\lambda'}^{\dagger}, a_{\lambda}] , \quad (3.10)$$

se evalúa aplicando la propiedad

$$[a_{\lambda'}^\dagger, a_\lambda] = -\delta_{\lambda\lambda'} \quad , \quad (3.11)$$

obteniéndose

$$[i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^\dagger, i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}] = \sum_{\lambda} \frac{\hbar}{2MN\omega_{\lambda}} (\vec{p} \cdot \hat{A}_{\lambda})^2. \quad (3.12)$$

Teniendo en cuenta esta expresión, la ecuación (3.9) se puede escribir en la forma

$$\begin{aligned} \langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}_{\vec{l}}} | m \rangle &= e^{i\vec{p} \cdot \vec{l}} \exp\left\{-\sum_{\lambda} \frac{\hbar}{4MN\omega_{\lambda}} (\vec{p} \cdot \hat{A}_{\lambda})^2\right\} \times \\ &\times \langle n | \exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^\dagger + i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda} + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} [i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^\dagger, i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}]\right\} | m \rangle, \quad (3.13) \end{aligned}$$

y, usando la regla del producto de exponenciales cuyos exponentes no conmutan, queda

$$\begin{aligned} \langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}_{\vec{l}}} | m \rangle &= e^{i\vec{p} \cdot \vec{l}} \exp\left\{-\sum_{\lambda} \frac{\hbar}{4MN\omega_{\lambda}} (\vec{p} \cdot \hat{A}_{\lambda})^2\right\} \times \\ &\times \langle n | \exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^\dagger\right\} \exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}\right\} | m \rangle. \quad (3.14) \end{aligned}$$

El bracket que figura en la ecuación anterior será calculado a continuación. Con ese objeto será evaluado

$$\exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}\right\} |m\rangle = e^{iD_{\lambda_1} a_{\lambda_1}} \dots e^{iD_{\lambda_N} a_{\lambda_N}} |m_{\lambda_1} \dots m_{\lambda_N}\rangle. \quad (3.15)$$

Al introducir la expresión (3.5) en la ecuación (3.15), ésta toma la forma

$$\exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}\right\} |m\rangle = \prod_{\lambda} e^{iD_{\lambda} a_{\lambda}} |m_{\lambda}\rangle, \quad (3.16)$$

en donde se ha puesto

$$\prod_{\lambda} |m_{\lambda}\rangle \equiv \frac{(a_{\lambda}^{\dagger})^{m_{\lambda}}}{\sqrt{m_{\lambda}!}} |0\rangle. \quad (3.17)$$

Desarrollando la exponencial según su definición

$$\exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}\right\} |m\rangle = \prod_{\lambda} \sum_{\mu_{\lambda}=0}^{\infty} \frac{(iD_{\lambda})^{\mu_{\lambda}}}{\mu_{\lambda}!} a_{\lambda}^{\mu_{\lambda}} |m_{\lambda}\rangle, \quad (3.18)$$

e introduciendo en esta expresión la propiedad de los operadores de aniquilación

$$a_{\lambda}^{\mu_{\lambda}} |m_{\lambda}\rangle = \sqrt{\frac{m_{\lambda}!}{(m_{\lambda}-\mu_{\lambda})!}} |m_{\lambda}-\mu_{\lambda}\rangle; \mu_{\lambda}=0, 1, \dots, m_{\lambda}, \quad (3.19)$$

queda

$$\begin{aligned} \exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}\right\} |m\rangle &= \\ &= \prod_{\lambda} \sum_{\mu_{\lambda}=0}^{m_{\lambda}} \frac{(iD_{\lambda})^{\mu_{\lambda}}}{\mu_{\lambda}!} \sqrt{\frac{m_{\lambda}!}{(m_{\lambda}-\mu_{\lambda})!}} |m_{\lambda}-\mu_{\lambda}\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Por otra parte, el vector bra de la expresión (3.14) puede escribirse en la forma

$$\langle n| e^{i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^{\dagger}} = \left(e^{-i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}} |n\rangle \right)^*, \quad (3.21)$$

de donde se desprende que

$$\langle n| e^{i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^{\dagger}} = \prod_{\lambda} \sum_{\nu_{\lambda}=0}^{n_{\lambda}} \frac{(iD_{\lambda}^*)^{\nu_{\lambda}}}{\nu_{\lambda}!} \sqrt{\frac{n_{\lambda}!}{(n_{\lambda}-\nu_{\lambda})!}} \langle n_{\lambda}-\nu_{\lambda}|. \quad (3.22)$$

De (3.20) y (3.22) se contruye finalmente el bracket

$$\begin{aligned} \langle n| \exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda}^* a_{\lambda}^{\dagger}\right\} \exp\left\{i\sum_{\lambda} D_{\lambda} a_{\lambda}\right\} |m\rangle &= \\ \prod_{\lambda} \sum_{\nu_{\lambda}=0}^{n_{\lambda}} \sum_{\mu_{\lambda}=0}^{m_{\lambda}} \frac{(iD_{\lambda}^*)^{\nu_{\lambda}} (iD_{\lambda})^{\mu_{\lambda}}}{\nu_{\lambda}! \mu_{\lambda}!} \sqrt{\frac{n_{\lambda}! m_{\lambda}!}{(n_{\lambda}-\nu_{\lambda})! (m_{\lambda}-\mu_{\lambda})!}} \delta_{n_{\lambda}-\nu_{\lambda}}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Consideremos uno de los 3 N factores que aparecen en la ecuación anterior. Sea, para ese factor, $n_\lambda < m_\lambda$. Se define el número entero positivo

$$\eta_\lambda \equiv m_\lambda - n_\lambda ; (n_\lambda < m_\lambda) . \quad (3.24)$$

El factor de (3.23) que se considera, después de sumar sobre μ_λ y hacer algunas transformaciones algebraicas, puede escribirse

$$\sqrt{\frac{n!}{(n+\eta)!}} (iD_\lambda)^\eta \sum_{\nu=0}^n (-1)^\nu |D_\lambda|^{2\nu} \frac{(n+\eta)!}{\nu!(\nu+\eta)!(n-\nu)!} , \quad (3.25)$$

en donde no se han escrito los índices λ por simplicidad de notación. La suma que aparece en esta expresión corresponde a la definición del polinomio generalizado de Laguerre

$$L_n^{(\eta)}(|D_\lambda|^2) . \quad (3.26)$$

Para el caso $n_\lambda > m_\lambda$ se obtiene el mismo resultado (3.25) cambiando n_λ por m_λ y definiendo $n_\lambda - m_\lambda = \eta_\lambda$.

Finalmente, considerando las expresiones (3.26), (3.25) y (3.23) en (3.14) se obtiene el elemento matriz

$$\begin{aligned} \langle n_l | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}} | m \rangle &= \\ &= e^{i\vec{p} \cdot \vec{e}} \exp \left\{ -\sum_{\lambda} \frac{\hbar}{4MN\omega_{\lambda}} (\vec{p} \cdot \hat{A}_{\lambda})^2 \right\} \prod_{\lambda} \sqrt{\frac{n_{\lambda}!}{(n_{\lambda} + \eta_{\lambda})!}} (iD_{\lambda})^{\eta_{\lambda}} L_{n_{\lambda}}^{(\eta_{\lambda})}(|D_{\lambda}|^2) \end{aligned} \quad (3.27)$$

en donde, con abuso de notación, se ha puesto n_{λ} en lugar de $\max(n_{\lambda}, m_{\lambda})$. El índice η_{λ} es definido por

$$\eta_{\lambda} \equiv |n_{\lambda} - m_{\lambda}| \quad , \quad (3.28)$$

número que corresponde a la cantidad de fonones- λ creados o aniquilados en una colisión. La ecuación (3.27) puede ser expresada en la forma

$$\begin{aligned} \langle n_l | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}} | m \rangle &= \\ &= e^{i(\vec{p} + \vec{q}) \cdot \vec{e}} \prod_{\lambda} i^{\eta_{\lambda}} \sqrt{\frac{n_{\lambda}!}{(n_{\lambda} + \eta_{\lambda})!}} e^{-\frac{1}{2}u_{\lambda}} u_{\lambda}^{\frac{1}{2}\eta_{\lambda}} L_{n_{\lambda}}^{(\eta_{\lambda})}(u_{\lambda}) \end{aligned} \quad (3.29)$$

en donde u_{λ} es definido por

$$u_{\lambda} = |D_{\lambda}|^2 \quad . \quad (3.30)$$

Los factores reales que preceden a los polinomios generalizados de Laguerre en la ecuación (3.29) son justamente los factores de normalización de esas funciones. La expresión obtenida para el elemento de matriz $\langle n | e^{i\mathbf{p} \cdot \vec{r}} | m \rangle$ constituye un resultado general, aplicable a cualquier situación en que aparezcan elementos de esa forma. Por ejemplo, en el problema de scattering de neutrones térmicos, la aplicación de la fórmula (3.29) permite obtener en forma simple y directa la sección eficaz diferencial de scattering de muchos fonones. Esto no es algo nuevo, pero constituye una solución más simple que las corrientemente presentadas por la literatura al respecto.

3.1 La aproximación de 1-fonón

La transformada de Fourier $V(\vec{p})$ que figura en la integral de la ecuación (3.3) tiende a cero muy rápidamente cuando p se hace mayor a 1 \AA^{-1} . Para este valor los números $|D_\lambda|$ son muy pequeños. Es posible entonces considerar

$$|D_\lambda| \ll 1 \quad (3.31)$$

y retener estos números sólo hasta el primer orden.

En el capítulo se desarrolla un criterio para determinar la exactitud de esta aproximación, que es, según se demostrará, equivalente a la aproximación de interacción de 1-fonón.

En la expresión (3.27), el factor

$D_\lambda^{\eta_\lambda} L_{n_\lambda}^{(\eta_\lambda)} (|D_\lambda|^2)$
 es un polinomio de la forma $\sum_{j=0}^{n_\lambda} A_j |D_\lambda|^{2j+\eta_\lambda}$;

luego, si se desprecian los órdenes superiores al primero en $|D_\lambda|$, a lo más uno de los números η_λ puede ser distinto de cero en el producto del segundo miembro de (3.27). Se tiene, por lo tanto,

$$\begin{aligned} \langle n_\lambda | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}_\lambda} | m \rangle &= \\ &= i\sqrt{n_\lambda+1} D_\lambda e^{i\vec{p} \cdot \vec{\ell}} \exp \left\{ -\sum_\lambda \frac{\hbar}{4MN\omega_\lambda} (\vec{p} \cdot \hat{A}_\lambda)^2 \right\} \quad , \quad (3.32) \end{aligned}$$

para

$$|m\rangle = |n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} \dots (n_\lambda+1) \dots n_{\lambda_N}\rangle \quad ; \quad (3.32')$$

$$\langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}_\ell} | m \rangle =$$

$$= i \sqrt{n_\lambda} D_\lambda e^{i\vec{p} \cdot \vec{\ell}} \exp \left\{ -\sum_\lambda \frac{\hbar}{4MN\omega_\lambda} (\vec{p} \cdot \hat{A}_\lambda)^2 \right\} \quad , \quad (3.33)$$

$$\text{para } |m\rangle = |n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} \dots (n_\lambda - 1) \dots n_{\lambda_N}\rangle \quad ; \quad (3.33')$$

$$\langle n | e^{i\vec{p} \cdot \vec{f}_\ell} | n \rangle = e^{i\vec{p} \cdot \vec{\ell}} \exp \left\{ -\sum_\lambda \frac{\hbar}{4MN\omega_\lambda} (\vec{p} \cdot \hat{A}_\lambda)^2 \right\} . \quad (3.34)$$

Las ecuaciones (3.32) y (3.33) corresponden respectivamente a creación y aniquilación de 1 fonón- λ , (3.34) a una colisión elástica.

Se evaluará la integral (3.3) para los elementos de matriz (3.32), (3.33) y (3.34) en aproximación de 1-fonón.

(i) Creación de un fonón- λ

Sustituyendo la expresión (3.32) y la definición (3.8) en (3.3), queda

$$\langle n | V(\vec{r}, \vec{f}_\ell) | m \rangle = i (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{(n_\lambda + 1)\hbar}{2MN\omega_\lambda}} \times$$

$$\times \sum_{\vec{q}} \int d^3\vec{p} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{p} + \vec{q}) \cdot \vec{\ell}} (\vec{p} \cdot \hat{A}_\lambda) V(\vec{p}) e^{-W(\vec{p})} ; \quad (3.35)$$

$$\text{con } W(\vec{p}) \equiv \sum_{\lambda} \frac{\hbar}{4MN\omega_{\lambda}} (\vec{p} \cdot \hat{A}_{\lambda})^2. \quad (3.36)$$

Introduciendo en (3.35) la identidad

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{p} + \vec{q}) \cdot \vec{l}} &= \\ &= N_s \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 \sum_{\vec{G}} \delta(\vec{p} + \vec{q} - \vec{G}) \sum_{l_z} e^{i(p_z + q_z) l_z}, \quad (3.37) \end{aligned}$$

(la notación es descrita en la sección 2) e integrando según \vec{p} , se obtiene la expresión

$$\begin{aligned} \langle n | V(\vec{r}, f) | m \rangle &= i \frac{N_s}{L^2} \left[\frac{\pi(n_{\lambda} + 1)\hbar}{MN\omega_{\lambda}} \right]^{1/2} \times \\ &\times \sum_{\vec{G}} e^{-i(\vec{G} - \vec{Q}) \cdot \vec{R}} \int dp_z e^{-ip_z z} (\vec{G} - \vec{Q} + p_z \hat{z}) \cdot \hat{A}_{\lambda} \times \\ &\times V(\vec{G} - \vec{Q}, p_z) e^{-W(\vec{G} - \vec{Q}, p_z)}, \quad (3.38) \end{aligned}$$

que da los elementos de matriz del potencial de gas-superficie para colisiones que crean un fonón- λ .

La suma sobre l_z se omite porque se ha supuesto que el átomo incidente interactúa solamente con la primera monocapa. Esto significa que en la expresión (2.1) para el potencial, l_z toma sólo el valor 0.

(ii) Aniquilación de un fonón- λ

Procediendo en forma análoga al caso anterior se obtiene

$$\begin{aligned} \langle n | V(\vec{r}, \vec{f}_\ell^{\rightarrow}) | m \rangle &= \\ &= i \frac{N_s}{L^2} \left(\frac{\pi \hbar n_\lambda}{MN \omega_\lambda} \right)^{1/2} \sum_{\vec{G}} e^{-i(\vec{G}-\vec{Q}) \cdot \vec{R}} \times \\ &\times \int dp_z e^{-ip_z z} (\vec{G}-\vec{Q} + p_z \hat{z}) \cdot \hat{A}_\lambda V(\vec{G}-\vec{Q}, p_z) e^{-W(\vec{G}-\vec{Q}, p_z)}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

(iii) Elementos diagonales

Al poner (3.34) en la ecuación (3.3) queda

$$\begin{aligned} v_n \equiv \langle n | V(\vec{r}, \vec{f}_\ell^{\rightarrow}) | n \rangle &= \sqrt{2\pi} \frac{N_s}{L^2} \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} \times \\ &\times \int dp_z e^{-ip_z z} V(\vec{G}, p_z) e^{-W(\vec{G}, p_z)}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Es interesante notar que v_n , el valor esperado del potencial para estado $|n\rangle$ del blanco, no depende de n en la aproximación de 1-fonón, se escribirá luego

$$v_n = \langle n | V | n \rangle = v. \quad (3.41)$$

Este resultado es fundamental para la solución

de las ecuaciones de scattering abordada en el capítulo siguiente.

La relación (3.41) implica que el promedio térmico del potencial es igual al valor medio cuántico cuando la hipótesis (3.31) es válida. La ecuación homogénea (2.13) es entonces equivalente a la ecuación (2.2) del paper de CCGM cuando las condiciones son tales que vale la aproximación de 1-fonón.

4. SOLUCION EN APROXIMACION DE 1-FONON

4.1 Las ecuaciones de scattering en aproximación de 1-fonón

Los elementos de matriz que conectan estados del blanco distintos son de orden 1 en D_λ , mientras los elementos de matriz diagonales son de orden cero en D_λ . En vista de esto, y observando la ecuación (2.11), se comprueba que la solución inhomogénea ψ_n^I , debe ser de orden 1 en D_λ . De otro modo ambos miembros de la ecuación no serían del mismo orden de magnitud. Físicamente, esto quiere decir que (3.31) implica que la intensidad elástica es mucho mayor que la inelástica. Si se escribe la ecuación (2.11) para la solución inhomogénea, considerando en el segundo miembro la forma de la solución general (2.17) y conservando términos sólo hasta el primer orden en D_λ , queda

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k_m^2 - \frac{2m}{\hbar^2} v) \psi_m^I &= \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \langle m | V | n \rangle \psi_n^H ; m \neq n , \quad (4.1) \end{aligned}$$

ecuación para la componente inelástica en aproximación de 1-fonón. En virtud de (3.41), se ha puesto $\langle m|v|m\rangle = v$. Para la solución homogénea rige

$$\left(\nabla^2 + k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2} v\right) \psi_n^H = 0 \quad , \quad (4.2)$$

siendo ψ_n^H la componente de scattering elástico.

El estado $|m\rangle$ difiere del estado inicial $|n\rangle$ en un fonón- λ .

Puesto que el sistema es aislado la energía se conserva y k_m está relacionado con k_n por la expresión

$$\frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \pm \hbar \omega_\lambda \quad . \quad (4.3)$$

4.2 Solución inhomogénea en aproximación de 1-fonón

Suponiendo que se conoce la solución general de (4.2) se obtendrá la solución asintótica para $z \rightarrow \infty$ de la ecuación (4.1). El conjunto de autofunciones $\psi_{\vec{k}}$ de la ecuación de autovalores

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} v\right) \psi_{\vec{k}} = 0 \quad (4.4)$$

es ortonormal y completo. La función ψ_n^H es uno de los elementos de ese conjunto. Haciendo

$$\psi_m^I = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}} \quad (4.5)$$

y poniendo este desarrollo en la ecuación (4.1), queda

$$\sum_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'} (k_m^2 - k'^2) \psi_{\vec{k}'} = \frac{2m}{\hbar^2} \langle m|V|n \rangle \psi_n \quad (4.6)$$

Multiplicando la ecuación anterior por $\psi_{\vec{k}}^*$ e integrando sobre todo el espacio se obtiene

$$c_{\vec{k}} (k_m^2 - k^2) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{r} \psi_{\vec{k}}^* \langle m|V|n \rangle \psi_n \quad (4.7)$$

De acuerdo a CCGM, las funciones $\psi_{\vec{k}}$ son de la forma

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}\vec{G}}(z) \quad ; \quad (4.8)$$

el caso particular $\vec{k} = \vec{k}_n$ se denotará

$$\psi_n = \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}_n + \vec{G}) \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{G}}(z) \quad (4.9)$$

Por otra parte, el elemento de matriz $\langle n|v|m\rangle$ es de la forma

$$\langle n|V|m\rangle = \sum_{\vec{G}} e^{-i(\vec{G}-\vec{Q})\cdot\vec{R}} F_{\vec{G}}^*(z) \quad , \quad (4.10)$$

en donde $F_{\vec{G}}^*(z)$ se obtiene comparando (4.10) con las expresiones (3.38) o (3.39), según se considere creación o aniquilación de un fonón- λ , respectivamente.

Poniendo (4.8), (4.9) y (4.10) en (4.7) e integrando según \vec{R} a través de la superficie L^2 , se obtiene

$$c_{\vec{k}}(k_m^2 - k^2) = \frac{2m}{\hbar^2} L^2 \sum_{\vec{G}'} \sum_{\vec{G}''} \sum_{\vec{G}} \delta_{\vec{k}_n - \vec{Q} - \vec{G} + \vec{G}' + \vec{G}''} \times \\ \times \int dz' \psi_{\vec{k}\vec{G}}^*(z') F_{\vec{G}}(z') \psi_{\vec{G}''}(z') \quad . \quad (4.11)$$

Al reemplazar esta ecuación en la expresión (4.5) y efectuar la suma sobre \vec{k} , resulta

$$\psi_m^I = \frac{2m}{\hbar^2} L^2 \sum_{\vec{G}\vec{G}'\vec{G}''} \int dk_z \int dz' \frac{\psi_{\vec{k}\vec{G}}^* F_{\vec{G}'} \psi_{\vec{G}''}}{k_m^2 - k^2 + i\eta} \psi_{\vec{k}} \quad , \quad (4.12)$$

con $\eta \rightarrow 0$ y \vec{k} definido por

$$\vec{k} = (\vec{K}_n - \vec{Q} - \vec{G} + \vec{G}' + \vec{G}'', k_z) \quad , \quad (4.13)$$

además se ha considerado espectro continuo para k_z .

4.3 Integración sobre k_z en el límite $z \rightarrow \infty$

Considérese la integral

$$I = \int dk_z \frac{f(\vec{k})}{k_m^2 - k^2 + i\eta} \quad ; \quad \eta \rightarrow 0 \quad , \quad (4.14)$$

en donde f es una función regular en todos los puntos.

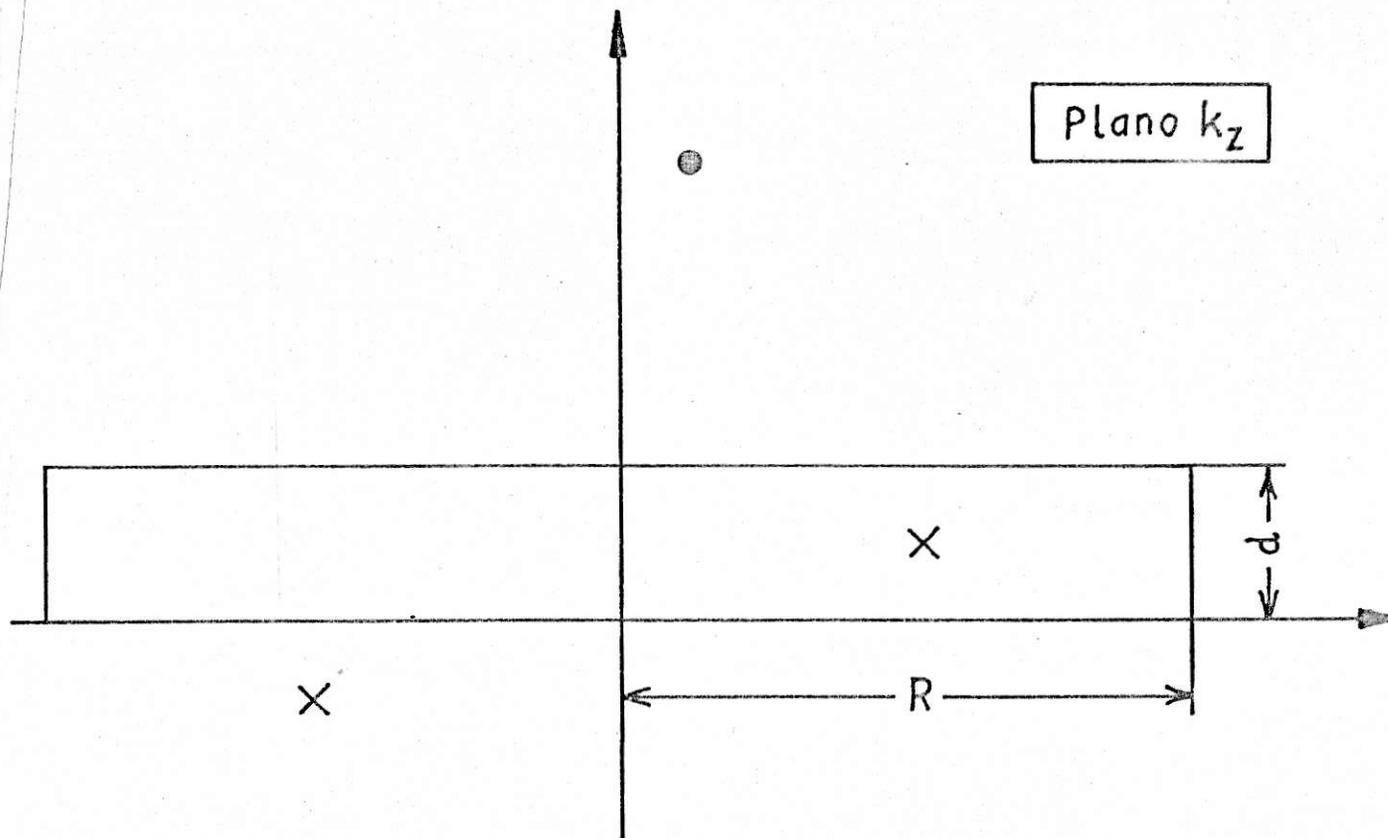
En el límite asintótico cuando $z \rightarrow \infty$ (CCGM), la función $\psi_{\vec{k}}$ tiende a una onda plana de la forma

$$\psi_{\vec{k}} \rightarrow e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} e^{ik_z z} \quad , \quad (4.15)$$

será entonces

$$I = - \int dk_z \frac{f(\vec{K}, \vec{k}_z) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} e^{ik_z z}}{(k_z - \sqrt{k_m^2 - K^2 + i\eta})(k_z + \sqrt{k_m^2 - K^2 + i\eta})} \quad ; \quad z \rightarrow \infty \quad . \quad (4.16)$$

Para evaluar I se integra por residuos a través de la trayectoria indicada en la figura 1, con d tan pequeño



● Polos para $k_{mz}^2 < 0$; X Polos para $k_{mz}^2 > 0$.

Figura 5 Trayectoria de integración para evaluar la integral (4.16).

como sea necesario. En los segmentos fuera del eje real, la función bajo el signo integral es multiplicada por el factor $\exp(-\text{Im}k_z z)$ y, dado que $z \rightarrow \infty$, la función se anula en esos tramos. Luego, se tiene que

$$I = -\frac{i\pi}{\sqrt{k_m^2 - K^2}} f(\vec{K}, \sqrt{k_m^2 - K^2}) \psi_{(\vec{K}, \sqrt{k_m^2 - K^2})}. \quad (4.17)$$

La solución inhomogénea (4.12) es entonces, en el límite $z \rightarrow \infty$,

$$\psi_m^I = -2\pi i \frac{m}{\hbar^2} L^2 \sum_{\vec{G}, \vec{G}', \vec{G}''} \frac{1}{k_z} \psi_{\vec{k}} \int dz' \psi_{\vec{k}\vec{G}}^* F_{\vec{G}'} \psi_{\vec{G}''}, \quad (4.18)$$

con \vec{k} dado por

$$\vec{k} = (\vec{K}_n - \vec{Q} - \vec{G} + \vec{G}' + \vec{G}'', \sqrt{k_m^2 - (\vec{K}_n - \vec{Q} - \vec{G} + \vec{G}' + \vec{G}'')^2}). \quad (4.19)$$

4.4 Integración sobre z'

Se calculará ahora la integral

$$\int dz' \psi_{\vec{k}\vec{G}}^* F_{\vec{G}'} \psi_{\vec{G}''} \quad (4.20)$$

usando las formas asintóticas de $\psi_{\vec{k}\vec{G}}$ y $\psi_{\vec{G}''}$ obtenidas

por CCGM. Dado que estas funciones son de alcance infinito y difieren apreciablemente de su expresión asintótica sólo dentro del rango del potencial, la aproximación será buena si el rango de $F_{\vec{G}}$, es mucho mayor que el del potencial. Esto se comprobará al efectuar los cálculos.

Para aniquilación de un fonón- λ , de las ecuaciones (4.10) y (3.39) se tiene que

$$F_{\vec{G}'}(\vec{z}) = i \left(\frac{\pi \hbar n_\lambda}{MN \omega_\lambda} \right)^{1/2} \frac{N_s}{L^2} \int dp e^{-ipz} \hat{A}_\lambda \cdot (\vec{G} - \vec{Q} + p\hat{z}) \times \\ \times V(\vec{G}' - \vec{Q}, p) e^{-W(\vec{G}' - \vec{Q}, p)} \quad (4.21)$$

De acuerdo a CCGM, en el límite $z \rightarrow \infty$

$$\psi_{\vec{k}\vec{G}}^* = D_{\vec{G}}^*(\vec{k}) (2\pi)^{-1/2} e^{-ik_{\vec{G}z}z} \quad (4.22)$$

y

$$\psi_{\vec{G}''} = D_{\vec{G}''}(\vec{k}_n) (2\pi)^{-1/2} e^{ik_{\vec{G}''z}z} \quad (4.23)$$

con

$$k_{\vec{G}z} = \sqrt{k^2 - (\vec{k} + \vec{G})^2} \quad (4.24)$$

Reemplazando en (4.20) se obtiene la expresión

$$\begin{aligned} \int dz \psi_{\vec{k}\vec{G}}^* F_{\vec{G}'} \psi_{\vec{G}''} &= \frac{i}{2} \left(\frac{\hbar n_\lambda}{\pi N M \omega_\lambda} \right)^{1/2} \frac{N_s}{L^2} D_{\vec{G}}^*(\vec{k}) D_{\vec{G}''}(\vec{k}_n) \times \\ &\times \int dz \int dp e^{i(k_n \vec{G}'' z - k_{\vec{G}z} - p)z} \hat{A}_\lambda \cdot (p\vec{z} + \vec{G}' - \vec{Q}) \times \\ &\times V(\vec{G}' - \vec{Q}, p) e^{-W(\vec{G}' - \vec{Q}, p)} \quad (4.25) \end{aligned}$$

Se observa en el segundo miembro de esta ecuación que la región en donde z está dentro del rango de acción del potencial contribuye poco a la integral, es justificado, entonces, usar las formas asintóticas (4.22) y (4.23). Integrando según z primero y según p después, resulta

$$\begin{aligned} \int dz \psi_{\vec{k}\vec{G}}^* F_{\vec{G}'} \psi_{\vec{G}''} &= \\ &= i \left(\frac{\pi \hbar n_\lambda}{M N \omega_\lambda} \right)^{1/2} \frac{N_s}{L^2} D_{\vec{G}}^*(\vec{k}) D_{\vec{G}''}(\vec{k}_n) \hat{A}_\lambda \cdot \vec{p} V(\vec{p}) e^{-W(\vec{p})}, \quad (4.26) \end{aligned}$$

en donde \vec{p} se define por

$$\vec{p} = (\vec{G}' - \vec{Q}, \sqrt{k_n^2 - (\vec{K}_n + \vec{G}' + \vec{G}'')^2} - \sqrt{k_m^2 - (\vec{K} + \vec{G}'')^2}). \quad (4.27)$$

La función inhomogénea en el límite asintótico $z \rightarrow \infty$ y para el caso de aniquilación de un fonón- λ , es finalmente obtenida poniendo este resultado en (4.18), queda así

$$\begin{aligned} \psi_m^I = & \frac{2\pi m}{\hbar} \left(\frac{\pi n_\lambda}{MN\hbar\omega_\lambda} \right)^{1/2} N_s \sum_{\vec{G}' \vec{G}''} D_{\vec{G}'}^*(\vec{k}) D_{\vec{G}''}(\vec{k}_n) \times \\ & \times \hat{A}_\lambda \cdot \vec{p} V(\vec{p}) e^{-W(\vec{p})} \frac{1}{k_z} \psi_{\vec{k}} \quad , \quad (4.28) \end{aligned}$$

con \vec{p} dado por la relación (4.27), \vec{k} se obtiene de (4.19) y $W(\vec{p})$ es definido por la ecuación (3.36). Los factores $D_{\vec{G}'}^*(\vec{k})$ y $D_{\vec{G}''}(\vec{k}_n)$ son las amplitudes de las líneas difractadas según los vectores recíprocos \vec{G}' y \vec{G}'' , para vectores de onda incidentes \vec{k} y \vec{k}_n , respectivamente; sus valores se obtienen mediante el método desarrollado por CCGM. La solución para creación de un fonón- λ se obtiene de (4.28) simplemente poniendo $n_\lambda + 1$ en lugar de n_λ .

A gran distancia del blanco, las funciones $\psi_{\vec{k}}$ son de la forma

$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad , \quad (4.29)$$

autofunciones de vector de onda \vec{k} . De las ecuaciones (4.19) y (4.3) se deduce que la energía de la partícula scattereada inelásticamente con absorción (o creación) de un fonón- λ es

$$E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \pm \hbar \omega_\lambda \quad , \quad (4.30)$$

ecuación que expresa la conservación de la energía en la colisión.

De las expresiones (4.29) y (4.19) se concluye que la componente tangencial del momentum total es conservada salvo un vector de la red recíproca. Expresando esto en función de vectores de onda, se puede escribir

$$\vec{K} = \vec{K}_n - \vec{Q} + (\text{vector de la red recíproca superficial}).$$

Las reglas de conservación postuladas por Goodmann () basado en observaciones empíricas, quedan de esta manera demostradas para el caso de colisiones de 1-fonón. Es interesante observar que la componente normal del momentum no es conservada. El origen de esto viene de suponer (sección 3.1) que la interacción ocurre solamente en la primera capa monoatómica. La diferencia de momentum normal produce un retroceso de toda la red. Como esta es supuesta de masa infinitamente grande, el retroceso no afecta a las soluciones.

El vector \vec{p} puede escribirse en la forma

$$\vec{p} = (\vec{k}_m + \vec{G}' + \vec{G}'', \sqrt{k_m^2 - (\vec{k}_m + \vec{G}' + \vec{G}'')^2}) - (\vec{k}_n + \vec{G}'', \sqrt{k_n^2 - (\vec{k}_n + \vec{G}'')^2}) \quad (4.32)$$

o, puesto en otra forma,

$$\vec{p} = (\text{vector } \vec{k}_m \text{ difractado según } \vec{G}' + \vec{G}'') - (\text{vector } \vec{k}_n \text{ difractado según } \vec{G}''). \quad (4.32')$$

La relación (4.32'), junto a la solución (4.28) sugieren una interpretación intuitiva del proceso de colisión.

El átomo incide con momentum $\hbar\vec{k}_n$. Al interactuar con la superficie es difractado según el vector recíproco \vec{G}'' . Antes de ser detectado absorbe (o crea) un fonón $-\lambda$ y es simultáneamente difractado, según \vec{G}' . Luego sufre un nuevo proceso de difracción, esta vez de acuerdo al vector $-\vec{G}$, y es detectado en un estado de difracción total $-\vec{G}+\vec{G}'+\vec{G}''$.

4.5 La sección eficaz diferencial para scattering inelástico

Partiendo del resultado (4.28) se derivará la sección eficaz diferencial para scattering inelástico. Se tiene que la función scattereada ψ_m^I es de la forma

$$\psi_m^I = f_{mn} e^{i(\vec{k}_n + \eta_\lambda \vec{Q}) \cdot \vec{R}} e^{ik_z z}, \quad (4.33)$$

en donde k_z está determinado por la ecuación de conservación de la energía (4.30) y se han omitido los vectores \vec{G} por simplicidad. La intensidad de partículas con vector de onda \vec{k} que dejan al blanco en estado $|m\rangle$, por unidad de flujo incidente, es entonces

$$I_{m\vec{k}} = \frac{k}{k_n} |f_{mn}|^2, \quad (4.34)$$

o, si se expresa esto como una densidad respecto de la energía,

$$\frac{dI_{mk}}{dE} = \frac{k}{k_n} |f_{mn}|^2 \delta(\hbar\omega - \eta_\lambda \hbar\omega_\lambda) \quad , \quad (4.35)$$

en donde se ha definido

$$\hbar\omega = E - E_n \quad . \quad (4.36)$$

Se quiere ahora determinar el número de haces de la forma (4.33) que existen para una variación $\Delta^2 \vec{K}$ y para una energía E dada (el módulo k está, por lo tanto, determinado).

Para la componente-x del vector de onda se tiene

$$\Delta K_x = -\Delta Q_x \quad , \quad (\eta_\lambda = 1) \quad ; \quad (4.37)$$

pero en ΔQ_x existen $\frac{L}{2\pi} \Delta Q_x$ valores permitidos para Q_x . Luego en ΔK_x existen $\frac{L}{2\pi} \Delta K_x$ posibles valores de K_x . Por lo tanto, se puede escribir

$$\Delta^2 \left(\frac{dI_{mk}}{dE} \right) = \frac{k}{k_n} |f_{mn}|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda) \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \Delta^2 \vec{K} \quad . \quad (4.38)$$

Los estados finales del blanco no son medidos, se sumará entonces sobre los estados $|m\rangle$ imponiendo la condición de que la componente del momentum paralela a la superficie sea conservada, se tiene así

$$\frac{d^3 I}{dE_f d^2 \vec{K}} = \frac{k_f}{k_n} \sum_m |f_{mn}|^2 \delta(\hbar\omega - \eta_\lambda \hbar\omega_\lambda) \quad \times$$

$$\times \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \delta(\vec{K}_f, \vec{K}_n + \eta_\lambda \vec{Q} - \vec{G} - \vec{G}' + \vec{G}''), \quad (4.39)$$

en donde $\delta(x,y)$ es el símbolo de Kronecker para las variables discretas x e y . Usando

$$\delta(x,y) \frac{L}{2\pi} = \delta(x-y) \quad (4.40)$$

para pasar a espectro aproximadamente continuo para esas variables, y sumando sobre n con pesos de acuerdo al ensemble canónico para introducir la interacción con el foco calorífico a temperatura T_s , se establece

$$\frac{d^3 I}{dE_f d^2 \vec{K}} = Z^{-N} \frac{k_f}{k_i} \sum_{m,n} e^{-\sum_\lambda \frac{\hbar\omega_\lambda}{k_b T_s} n_\lambda} |f_{mn}|^2 \quad \times$$

$$\times \delta(\vec{K}_f - \vec{K}_i - \eta_\lambda \vec{Q} + \vec{G} - \vec{G}' - \vec{G}'') \delta(\hbar\omega - \eta_\lambda \hbar\omega_\lambda). \quad (4.41)$$

Se ha designado por K_b a la constante de Boltzmann y el factor de normalización Z^N es dado por

$$Z^N = \prod_{\lambda} \sum_n e^{-\frac{\hbar \omega_{\lambda}}{K_b T_s} n_{\lambda}} \quad (4.42)$$

La sección eficaz diferencial de scattering se obtiene reemplazando

$$d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \sin\theta \left| \frac{\partial(\theta, \varphi)}{\partial(K_x, K_y)} \right|_{k=cT_s} d^2 \vec{K} \quad (4.43)$$

en donde θ es el ángulo que forma \vec{k}_f con la normal a la superficie. Evaluando el Jacobiano de la expresión (4.43) y reemplazando en (4.41), queda

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE} = & \frac{k_f}{k_i \cos\theta} Z^{-N} \sum_{m,n} \exp\left(-\sum_{\lambda} \frac{\hbar \omega_{\lambda}}{K_b T_s} n_{\lambda}\right) |k_z f_{mn}|^2 \times \\ & \times \delta(\vec{K}_f - \vec{K}_i + \vec{Q} + \vec{G} - \vec{G}' - \vec{G}'') \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\lambda}) \quad (4.44) \end{aligned}$$

Al evaluar Z^N , reemplazar en la ecuación (4.44) la expresión f_{mn} obtenida antes y sumar sobre n_{λ} , se obtiene finalmente la ecuación

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\sigma_{\vec{G}}}{d\Omega dE_f} &= (2\pi)^3 \left(\frac{m}{\hbar}\right)^2 \frac{N_s^2}{2MN} \frac{k_f}{k_i \cos\theta_i} \sum_{\lambda} \frac{1}{\hbar\omega_{\lambda}} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\lambda}/k_b T_s} - 1} \times \\
&\times \left| \sum_{\vec{G}', \vec{G}''} D_{-\vec{G} + \vec{G}' + \vec{G}''}^*(\vec{k}_f) D_{\vec{G}''}(\vec{k}_i) (\hat{A}_{\lambda} \cdot \vec{p}) V(\vec{p}) e^{-W(\vec{p})/2} \right|^2 \times \\
&\times \delta(\vec{k}_f - \vec{k}_i + \vec{Q} - \vec{G}) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_{\lambda}) , \quad (4.45)
\end{aligned}$$

en donde se ha hecho el cambio de variables

$$-\vec{G} + \vec{G}' + \vec{G}'' \longrightarrow \vec{G}$$

y se considera scattering en las cercanías del pico de difracción \vec{G} . La expresión (4.45) es la expresión más general para la sección eficaz diferencial de scattering con aniquilación de 1-fonón; la ecuación correspondiente para creación de fonones se obtiene en forma análoga. La suma sobre λ puede ser evaluada haciendo la sustitución

$$\sum_{\lambda} \longrightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{\mu} \int d^3\vec{q} \quad . \quad (4.46)$$

5. CRITERIO PARA LA APROXIMACION DE UN-FONON Y TERMINOS DE CORRECCION ()

Se demostró en el capítulo 3 que la hipótesis de interacción con intercambio de a lo más un fonón implica que la intensidad inelástica es mucho menor que la elástica. En este capítulo se verá hasta que punto es válida la proposición inversa. Para eso se procederá a obtener una solución que considere colisiones de muchos fonones, bajo la suposición de que las intensidades inelásticas son mucho menores a las intensidades de los picos elásticos. Esta hipótesis es, sin duda, menos restrictiva que la aproximación de 1-fonón, usada en los capítulos anteriores, y la solución (4.28) (para aproximación de 1-fonón) constituye un caso particular de la obtenida aquí. Parecería, entonces, más adecuado haberla planteado desde el comienzo. Las razones para no haberlo hecho así son varias:

- El método general empleado para resolver las ecuaciones de scattering es el mismo, tanto para la aproximación de 1 - fonón como para la

aproximación de intensidades inelásticas débiles. Se prefirió, por lo tanto, mostrar el método en un caso más simple para luego aplicarlo a las ecuaciones de muchos fonones, de apariencia más complicada.

- En general, al realizar los experimentos se buscan las condiciones en que la aproximación de 1-fonón es aplicable, por ser el análisis de los resultados más simple en esos casos. Los términos de muchos fonones son interesantes sólo como términos de corrección.

- Cuando las intensidades inelásticas son débiles, las colisiones con intercambio de un fonón son predominantes. Esto se comprueba comparando los términos de la expresión (5.24).

Conviene advertir que la relación (3.31) no constituye un buen criterio para decidir acerca de la conveniencia de la aproximación de 1-fonón. Esto es debido a que los términos de muchos fonones son más numerosos que los términos de 1-fonón. En efecto, si existen N de estos últimos, hay N^2 términos que implican intercambio de 2 fonones, y así sucesivamente.

A su vez, el tamaño de estos términos es función de la temperatura del blanco y la energía del haz.

Denotando por

$$\mathcal{L}_n^{(\eta)}(u) = \sqrt{\frac{n!}{(n+\eta)!}} u^{\frac{1}{2}\eta} e^{-\frac{1}{2}u} L_n^{(\eta)}(u) \quad (5.1)$$

los polinomios generalizados de Laguerre con sus respectivos factores de normalización, la ecuación (3.29) queda expresada en la forma

$$\langle n|e^{i\vec{p}\cdot\vec{f}}|m\rangle = i^\eta \exp\left[i\left(\vec{p} + \sum_\lambda \eta_\lambda \vec{q}_\lambda\right)\cdot\vec{e}\right] \prod_\lambda \mathcal{L}_{n_\lambda}^{(\eta_\lambda)}(u_\lambda), \quad (5.2)$$

con

$$\eta = \sum_\lambda \eta_\lambda \quad (5.3)$$

y

$$u_\lambda = \frac{\hbar}{2MN\omega_\lambda} (\vec{p}\cdot\vec{A}_\lambda)^2. \quad (5.4)$$

Poniendo este resultado en la ecuación (3.3), se obtiene el elemento de matriz del potencial

$$\langle n|V(\vec{r},\vec{p})|m\rangle = \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{G} - \sum_\lambda \eta_\lambda \vec{Q})\cdot\vec{R}} F_{\vec{G}}^{mn}(z), \quad (5.5)$$

en donde

$$F_{\vec{G}}^{mn}(z) = i^n \sqrt{2\pi} \frac{N_s}{L^2} \int dp_z e^{ip_z z} V(\vec{p}) \prod_{\lambda} \mathcal{L}_{n_{\lambda}}^{(\eta_{\lambda})}(\mu_{\lambda}) \quad (5.6)$$

y

$$\vec{p} = (\vec{G} - \sum_{\lambda} n_{\lambda} \vec{Q}, p_z) . \quad (5.7)$$

Los elementos de matriz diagonales son dados por

$$\langle n | V(\vec{r}, \vec{r}') | n \rangle =$$

$$= \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} \sqrt{2\pi} \frac{N_s}{L^2} \int dp_z e^{ip_z z} V(\vec{p}) \prod_{\lambda} \mathcal{L}_{n_{\lambda}}^{(0)}(\mu_{\lambda}) . \quad (5.8)$$

La ecuación general (2.11), escrita para el caso $n' = n$ es

$$(\nabla^2 + k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \langle n | V | n \rangle) \psi_n = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{m \neq n} \langle n | V | m \rangle \psi_m . \quad (5.9)$$

Toda la dependencia de esta ecuación con estados del blanco distintos del estado inicial $|n\rangle$ está contenido en el segundo miembro. Luego la hipótesis de intensidad inelástica mucho menor a la intensidad elástica equivale a suponer

$$\langle n|V|m\rangle \ll \langle n|V|n\rangle ; \quad (5.10)$$

de este modo, si $\langle n|v|m\rangle$ se aproxima a cero, la ecuación (5.9) se aproxima a la ecuación homogénea (2.13) para $n' = n$. Se definió el orden de magnitud ϵ en la forma

$$\frac{\langle n|V|m\rangle}{\langle n|V|n\rangle} \approx \frac{|\psi_{inelástico}|}{|\psi_{elástico}|} \approx \epsilon \ll 1 . \quad (5.11)$$

Los polinomios de Laguerre ortonormalizados

$L_n^{(\eta)}$ son de la forma

$$(A_0 u^{\frac{1}{2}\eta} + A_1 u^{1+\frac{1}{2}\eta} + \dots + A_n u^{n+\frac{1}{2}\eta}) e^{-\frac{1}{2}u} , \quad (5.12)$$

y, de la definición (5.4), se sabe que $u_\lambda \ll 1$.

Los coeficientes $F_G^{mn}(z)$ son entonces de la forma

$$F_G^{mn}(z) = \int dp_z e^{ip_z z} V(\vec{p}) e^{-\frac{1}{2}\sum_\lambda u_\lambda} (a_0 \prod_\lambda u_\lambda^{\frac{1}{2}\eta_\lambda} + \text{términos de orden superior en } u_\lambda) \quad (5.13)$$

y, para el caso particular del coeficiente $F_G^{nn}(z)$ del

elemento de matriz diagonal,

$$F_{\vec{G}}^{nn}(\underline{z}) = \int dp_z e^{ip_z z} V(\vec{p}) e^{-\frac{i}{2} \sum_{\lambda} u_{\lambda}} (b_0 + \sum_{\lambda} b_{1\lambda} u_{\lambda} + \text{términos de orden superior en } u_{\lambda}) , \quad (5.14)$$

en donde a_0 y b_0 son del mismo orden de magnitud.

De las ecuaciones (5.13), (5.14) y (5.8) se concluye que, si $\langle n|v|m\rangle = \epsilon$, es

$$\begin{aligned} \langle n|V(\vec{r}, \vec{r}')|n\rangle &= \\ &= \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} \sqrt{2\pi} \frac{N_s}{L^2} \int dp_z e^{ip_z z} V(\vec{p}) e^{-\frac{i}{2} u_{\lambda}} + O(\epsilon) ; \quad (5.15) \end{aligned}$$

luego, el valor medio del potencial de interacción para estado $|n\rangle$ del blanco no es dependiente de $|n\rangle$ en la aproximación $\epsilon = 0$. Se escribirá

$$\langle n|V(\vec{r}, \vec{r}')|n\rangle = v(\vec{r}) + O(\epsilon) . \quad (5.16)$$

La ecuación (2.11) para la componente inhomogénea $\psi_{n'}^I$ es

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k_{n'}^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \langle n'|V|n'\rangle) \psi_{n'}^I &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{m \neq n'} \langle n'|V|m\rangle \times \\ \times (\delta_{mn} \psi_n^H + \psi_m^I) . \quad (5.17) \end{aligned}$$

Considerando que ψ_n^I es del orden de ϵ y eliminando términos de orden superior al primero en ϵ , queda

$$(\nabla^2 + k_m^2 - \frac{2m}{\hbar^2} v(\vec{r})) \psi_m^I(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \langle m | V(\vec{r}, \vec{r}') | n \rangle \psi_n^H(\vec{r}), m \neq n. \quad (5.18)$$

Se ha supuesto que el sistema total es aislado, luego los vectores \vec{k}_m están relacionados con \vec{k}_n por la ecuación de conservación de la energía

$$\frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \sum_{\lambda} \hbar \eta_{\lambda} \omega_{\lambda} \quad (5.19)$$

5.1 La solución inhomogénea

La ecuación (5.18) es de la misma forma de la ecuación (4.1) para colisiones de 1-fonón. Los desarrollos de los elementos de matriz $\langle n | v | m \rangle$, dados por la expresión (5.5), son también de la misma forma de los elementos de matriz empleados en el capítulo 4. Formalmente, sólo hay diferencias en las expresiones de los coeficientes $F_G^{mn}(z)$ y en la definición del

vector \vec{p} . Como la forma de estas expresiones no interviene en los desarrollos llevados a cabo en el capítulo 4, se puede operar en la misma forma. De este modo se obtiene para la función inhomogénea

$$\psi_m^I = i^{\eta-1} (2\pi)^{3/2} \frac{m}{\hbar^2} N_s \sum_{\vec{G}, \vec{G}', \vec{G}''} D_{\vec{G}}^*(\vec{k}) D_{\vec{G}''}(\vec{k}_n) \times$$

$$\times V(\vec{p}) \prod_{\lambda} \mathcal{L}_{n_{\lambda}}^{(\eta_{\lambda})}(u_{\lambda}) \frac{1}{k_z} \psi_{\vec{k}}^{\rightarrow}, \quad (5.20)$$

en donde los vectores \vec{p} y \vec{k} son definidos por

$$\vec{p} = (\vec{G}' - \sum_{\lambda} \eta_{\lambda} \vec{Q}, k_{\vec{G}z} - k_{n\vec{G}z}) \quad (5.21)$$

y

$$\vec{k} = (\vec{k}_n + \sum_{\lambda} \eta_{\lambda} \vec{Q} - \vec{G} - \vec{G}' + \vec{G}'', \sqrt{k_m^2 - (\vec{k}_n + \sum_{\lambda} \eta_{\lambda} \vec{Q} - \vec{G} - \vec{G}' + \vec{G}'')^2}). \quad (5.22)$$

Para $z \rightarrow \infty$, la función $\psi_{\vec{k}}^{\rightarrow}$ tiende asintóticamente a la forma

$$\psi_{\vec{k}}^{\rightarrow} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (5.23)$$

Las ecuaciones (5.23), (5.22) y (5.19) expresan la conservación de la energía y del momentum tangencial a la superficie, de acuerdo a las reglas postuladas por Goodman (23).

De la ecuación para la función de onda (5.20) y la expresión (4.44) se deduce que la sección eficaz diferencial de scattering de muchos fonones es

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} &= (2\pi)^3 N_s^2 \frac{m^2}{\hbar^4} \frac{k_f}{k_i \cos\theta} Z^{-N} \sum_n \sum_{\{\eta_\lambda\}} \left| \sum_{\vec{G}\vec{G}'\vec{G}''} \right. & \times \\ &\times D_{-\vec{G}-\vec{G}'+\vec{G}''}^*(\vec{k}_f) D_{\vec{G}''}(\vec{k}_i) V(\vec{p}) \prod_\lambda \left| e^{-\frac{\hbar\omega_\lambda}{2k_b T_s} n_\lambda} \mathcal{L}_{n_\lambda}^{(\eta_\lambda)}(u_\lambda) \right|^2 & \times \\ &\times \delta(\vec{k}_f - \vec{k}_i - \sum_\lambda \eta_\lambda \vec{Q} - \vec{G}) \delta(\hbar\omega - \sum_\lambda \hbar\eta_\lambda \omega_\lambda) \quad , & (5.24) \end{aligned}$$

en donde \vec{p} se obtiene de (5.21), poniendo k_f y k_i en lugar de k y k_n , respectivamente. Esta ecuación constituye una generalización de la expresión (4.45) y es válida siempre cuando las intensidades inelásticas son mucho menores a las elásticas. La ecuación (5.24) permite calcular las contribuciones de las colisiones con intercambio de un número finito de fonones.

6. COMPARACION CON RESULTADOS EXPERIMENTALES

Con el propósito de probar la teoría con resultados experimentales, se calculará la sección eficaz diferencial para el sistema He-LiF. Los cálculos se restringirán a las vecindades del pico (0,0), para velocidad incidente $v_i = 1,70 \times 10^5$ cm/seg, ángulo de incidencia $\theta_i = 65^\circ$ y temperatura del blanco $T_s = 150K$. Estas son las condiciones experimentales usadas por B. Williams (18).

Los parámetros del potencial de interacción y las relaciones de dispersión de los fonones superficiales son, hasta el momento, desconocidas. Como el interés de estos cálculos no es el de obtener estas magnitudes, sino comprobar el acuerdo de los resultados teóricos con las mediciones, aquellos parámetros no disponibles serán estimados por otros métodos. Es preciso, entonces, tener en cuenta el carácter estimativo de los cálculos que se muestran a continuación; un trabajo más riguroso y exhaustivo está, en el momento de ser escrita esta tesis, en desarrollo. En

consecuencia de esto, se dirá que una aproximación de 10% es buena. La sección eficaz diferencial será calculada en forma absoluta, es decir, no será requerida normalización a la curva experimental.

Considerando que sólo dan contribución apreciable los fonones de gran longitud de onda de la rama acústica, se puede escribir

$$\omega_{\lambda} = \alpha_{\mu} q \quad , \quad (6.1)$$

en donde α_{μ} es la velocidad del sonido para ondas de índice de polarización μ . No está aún claro si los modos de vibración de volumen o los superficiales predominan en las colisiones inelásticas sobre superficies no metálicas (18,24). La expresión (4.45) es válida para cualquier tipo de vibración de la red, sin embargo, la evaluación de la sección eficaz se hará considerando solamente ondas superficiales, tal como es sugerido por Williams (18). El buen acuerdo con los datos experimentales que se obtiene es un buen argumento en favor de tal hipótesis, sin embargo, una solución definitiva requiere evaluar la contribución de volumen. Esta evaluación constituye un tra-

bajo laborioso y escapa a los propósitos de esta sección.

Las colisiones de 1-fonón producen un cambio Δk pequeño en el módulo del vector de onda incidente, esto hace posible usar la relación aproximada (18)

$$\Delta k = \frac{\alpha \mu}{v_i} q \quad (6.2)$$

Para el potencial de interacción de dos cuerpos se considerará un potencial de Morse esférico (25)

$$V(\vec{r}) = D e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2D e^{-\alpha(r-r_0)} \quad , \quad (6.3)$$

cuya transformada de Fourier es

$$V(p) = \frac{8D\alpha}{\sqrt{2\pi}} e^{\alpha r_0} \left[\frac{e^{\alpha r_0}}{(4\alpha^2 + p^2)^2} - \frac{1}{(\alpha^2 + p^2)^2} \right] \quad . \quad (6.4)$$

El exponente $W_{(p)}$ se calcula usando la aproximación de Debye, el resultado obtenido es suficientemente pequeño para justificar el uso de tal aproximación:

$$2W(p) = \frac{M_{Li} + M_F}{M_{Li} M_F} \left(\frac{9V_c}{16\pi^2} \right)^{1/3} \frac{\hbar}{2\alpha} p^2, \quad (6.5)$$

en donde v_c es el volumen de la celda unitaria.

Haciendo $\vec{G} = 0$ y sustituyendo las ecuaciones (6.1), (6.2) y la restricción $q_z = 0$ en la expresión general (4.45) y luego integrando sobre \vec{q} y E_F , se obtiene

$$\frac{d\sigma_{\vec{G}}}{d\Omega} = N_s \left(\frac{m}{\hbar} \right)^2 \frac{e^{-2W(p)} (k_i + \frac{\alpha}{V_i} Q)}{2\hbar k_i \alpha \cos \theta} \frac{Q}{e^{\hbar\alpha Q/K_b T_s} - 1} \times$$

$$\times \left[\frac{1}{M_{Li}} V_{He-Li}^2(p) + \frac{1}{M_F} V_{He-F}^2(p) \right], \quad (6.6)$$

en donde sólo el término $\vec{G}' = \vec{G}'' = 0$ ha sido considerado y la sección eficaz diferencial ha sido expresada como una fracción de la intensidad especular. Para $\vec{G} \neq 0$, se comprueba en la expresión (4.32) que $p \approx |\vec{G}'| > 1 \text{ \AA}^{-1}$, $V(p)$ entonces toma valores muy pequeños. Por otra parte, de los valores para las intensidades elásticas medidos por Williams, se comprueba que el error cometido al despreciar términos con

$\xi'' \neq 0$ es del orden de 10%, no significativo para nuestros propósitos.

Para la velocidad del sonido se usará el valor

$$\alpha_L = 6,764 \times 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{seg}},$$

obtenido por Briscoe y Squire (26) mediante métodos ultrasónicos. Este valor corresponde a la velocidad del sonido longitudinal para ondas de volumen en LiF a 150 K. El valor de la velocidad del sonido superficial es en general menor al valor de la velocidad del sonido de volumen. En la sección siguiente se muestra que el valor correcto es de aproximadamente la mitad del número escrito arriba.

Los parámetros de los potenciales de dos cuerpos no han sido aún medidos. Se usarán valores de r_0 y D estimados por A. Tsuchida (8), basado en mediciones de potenciales de interacción entre átomos de gases nobles. Estos son

$$D_{\text{He-F}} = 27.13 \times 10^{-16} \text{ erg}, \quad r_{0(\text{He-F})} = 2,98 \text{ \AA},$$

$$D_{\text{He-Li}} = 14.90 \times 10^{-16} \text{ erg}, \quad r_{0(\text{He-Li})} = 2,88 \text{ \AA}.$$

De los parámetros $a_{\text{He-Li}}$ y $a_{\text{He-F}}$ sólo se sabe que son cercanos a 1 \AA^{-1} (27). Usando

$$a_{\text{He-F}} = 0,69 \text{ \AA}^{-1} ; \quad a_{\text{He-Li}} = 0,96 \text{ \AA}^{-1},$$

se obtuvo el resultado que muestra la figura 6. La curva de trazo continuo corresponde a nuestra predicción teórica para scattering en el plano de incidencia. Los puntos discretos son tomados del experimento de Williams (18) para rotación del cristal en $0,9^\circ$ en torno de la dirección $\langle 100 \rangle$, por lo que las condiciones experimentales son ligeramente distintas a los supuestos usados en los cálculos. Estos fueron realizados para un detector puntual que se mueve en el plano de incidencia, definido por la normal y la dirección $\langle 100 \rangle$. En ese plano, los vectores \vec{Q} y \vec{p} están relacionados con el ángulo de scattering por

$$Q = k_i \frac{\text{sen } \theta_i - \text{sen } \theta}{1 + (\alpha/v_i) \text{sen } \theta} \quad (6.7)$$

y

$$p^2 = Q^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar} Q \cos \theta (\cos \theta - \cos \theta_i) + k_i^2 (\cos \theta - \cos \theta_i)^2, \quad (6.8)$$

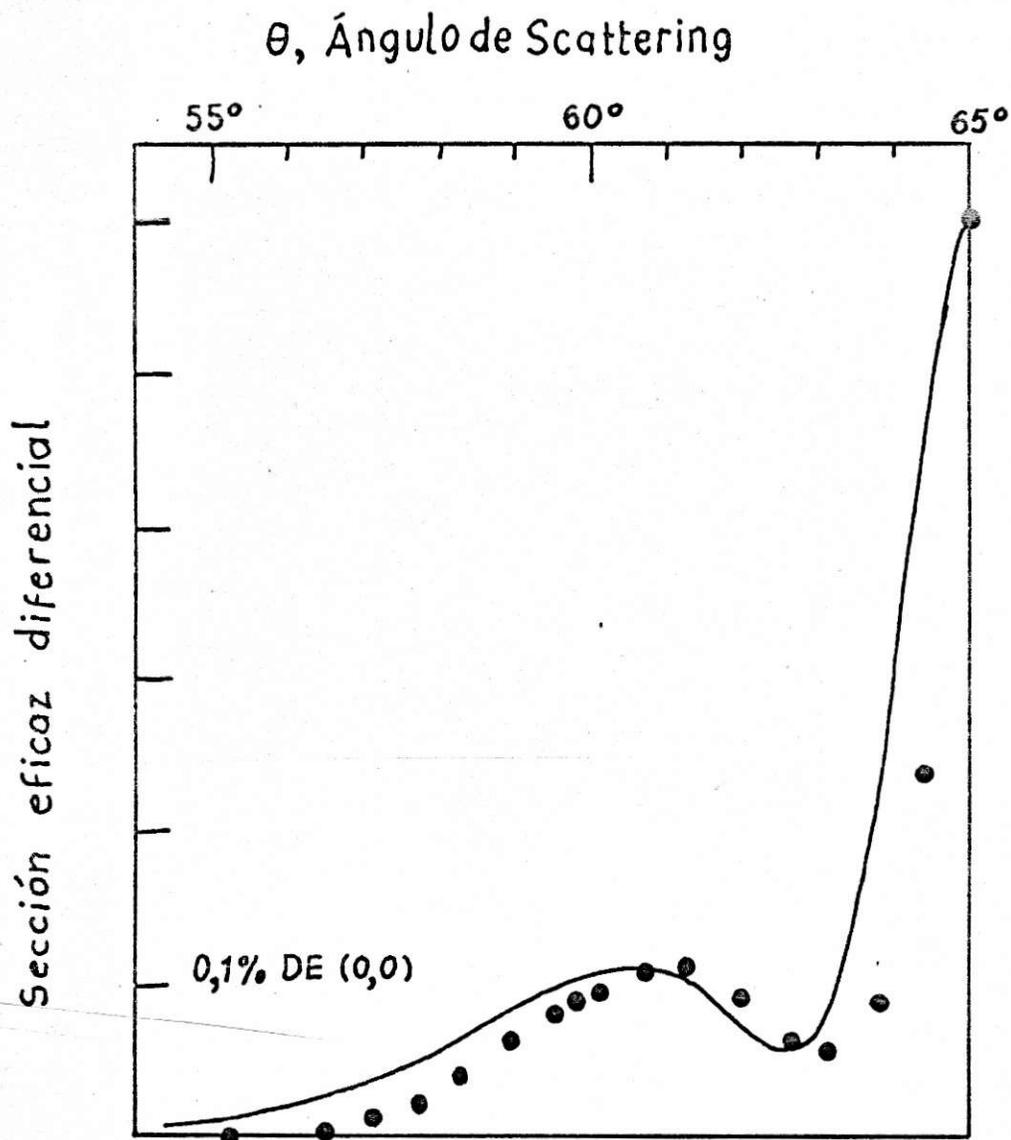


Figura 6 Scattering de He por LiF (100) en las cercanías del pico especular ($\theta_i = 65^\circ$). Los puntos discretos fueron tomados de mediciones de B. Williams. La curva continua corresponde a la predicción de esta teoría.

ecuaciones que se deducen fácilmente de las definiciones de estas magnitudes al imponer las restricciones introducidas en este capítulo.

En los cálculos descritos no se hizo variar los parámetros para obtener el mejor ajuste a los puntos experimentales por las razones establecidas al principio. Las únicas excepciones son los valores de $a_{\text{He-F}}$ y $a_{\text{He-Li}}$, los cuales fueron elegidos para ajustar las alturas de los máximos alrededor de 65° y 61° . Los resultados están de acuerdo con lo esperado.

La curva mostrada en la figura 6 aparece dilatada en el sentido horizontal. Esto se explica por la adopción de un valor de la velocidad del sonido mayor que el valor real. De las ecuaciones (6.7) y (6.8) se deduce que, al variar α , varía la relación entre las magnitudes p y Q en función de θ , dilatando o contrayendo la escala de abcisas.

Teniendo en cuenta las aproximaciones hechas y el carácter absoluto del cálculo de la sección eficaz, la figura 6 muestra un excelente acuerdo entre la curva teórica y la experimental. Para $\theta > 65^\circ$ (co-

respondiente a creación de fonones), los resultados son muy similares, salvo por una ligera magnificación del eje θ , consistente con las mediciones de Williams.

6.1 Rotación del blanco

En esta sección se obtendrá la relación entre \vec{Q} y el ángulo de scattering θ cuando el cristal es rotado en un ángulo φ en torno de la intersección del plano de incidencia con la superficie-blanco.

Se sabe que

$$\vec{K}_i = \vec{K}_f + \vec{Q} + \vec{G} \quad . \quad (6.9)$$

Si se considera contribución predominante de fonones superficiales, el diagrama de Ewald correspondiente a (6.9) es el indicado en la figura 7. La intersección del plano del detector con el plano de la superficie coincide con OX. El eje OZ coincide con la normal antes de la rotación. En la figura 7(a), k^+ es la superficie de scattering para aniquilación de un fonón de vector de onda \vec{Q} , su radio es determinado por la relación (6.2). DC es la proyección de la barra de la

red recíproca, denotada por N , sobre el plano del detector, XZ . El vector \vec{Q}_1 es la proyección de \vec{Q} sobre el mismo plano.

La figura 7(b) es una vista lateral de la misma situación geométrica. El vector \vec{Q}_2 es la proyección sobre el plano YZ del vector \vec{Q} . Se tiene, entonces,

$$\vec{Q} = \vec{Q}_1 + \vec{Q}_2 \quad , \quad (6.10)$$

y el vector \vec{k}_f es tal que cumple la ecuación de conservación de la energía y la ecuación de conservación del momentum tangencial (6.9). De las figuras 7(a) y 7(b) se tiene

$$Q_1 = k_i \text{sen } \theta_N - k \text{sen } \theta \quad , \quad (6.11)$$

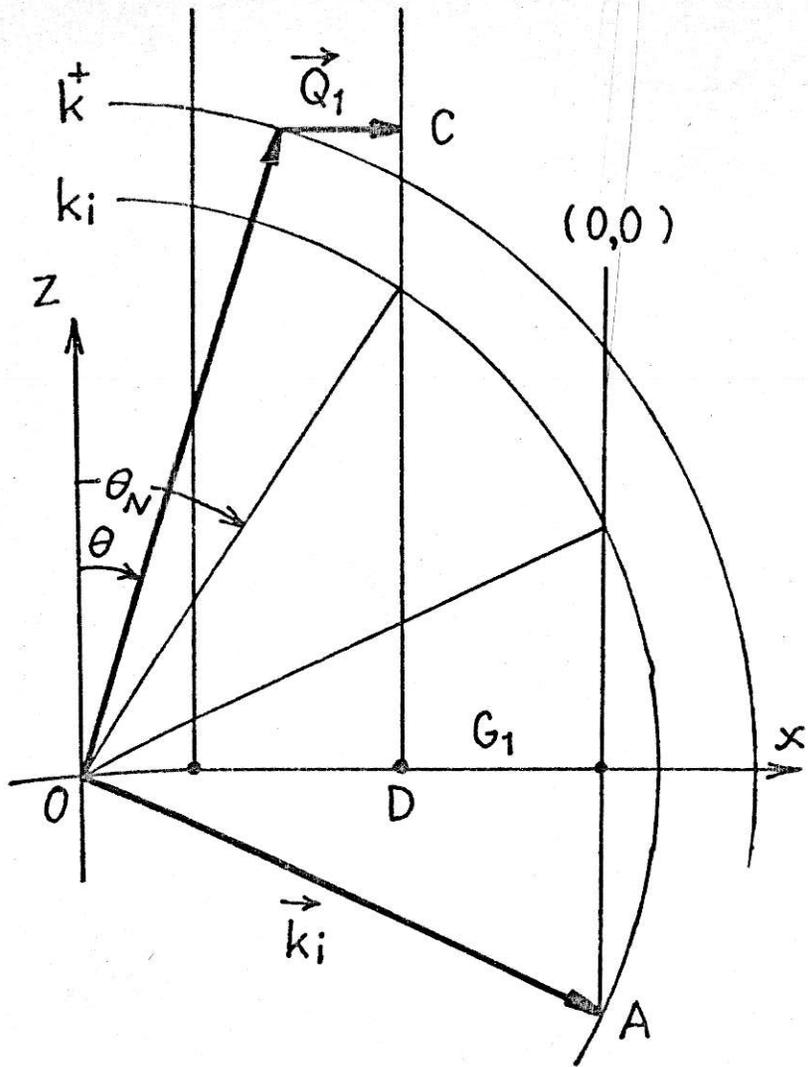
$$Q_2 = \text{sen } \varphi (k_i \cos \theta_i + k \cos \theta) - G_2 \quad (6.12)$$

y

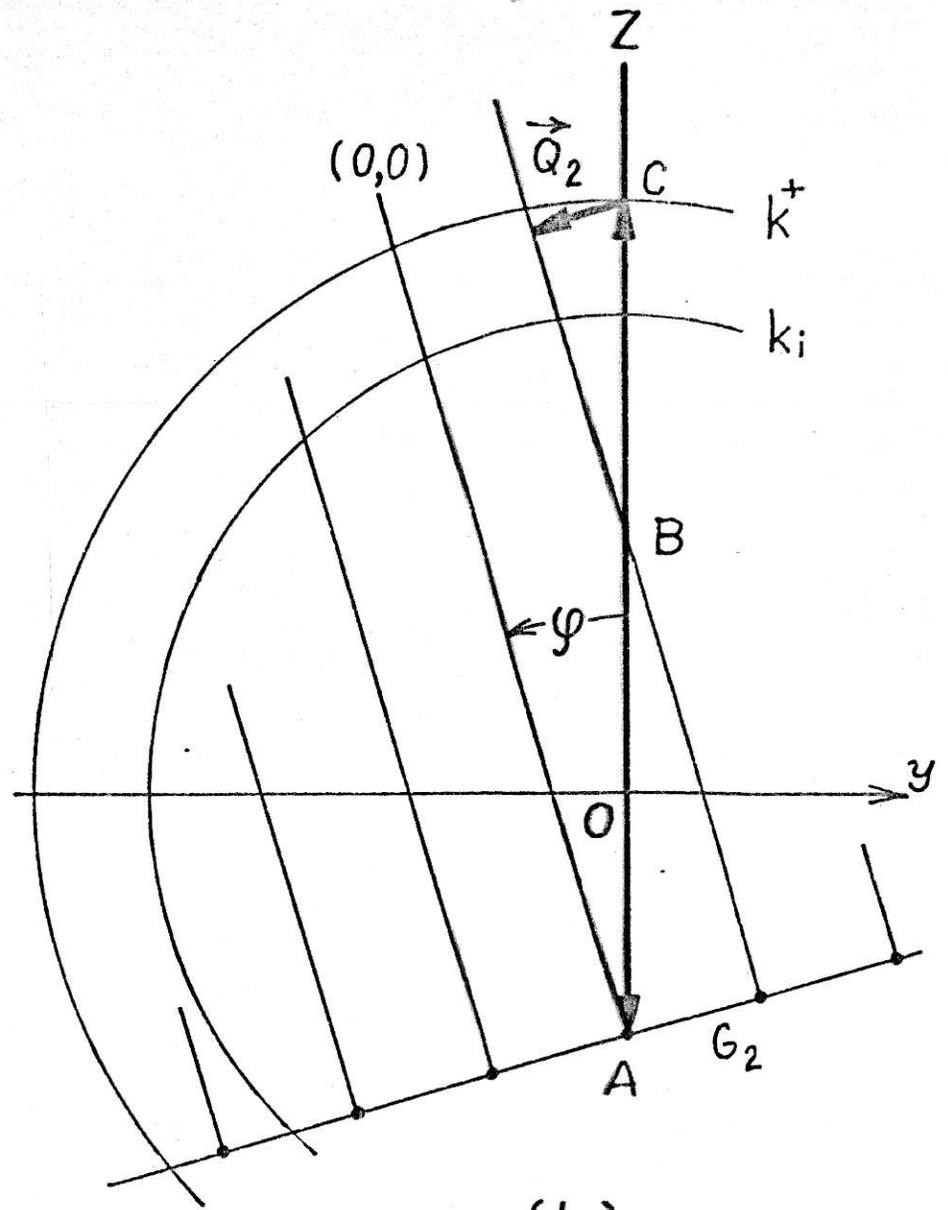
$$Q^2 = Q_1^2 + Q_2^2 \quad . \quad (6.13)$$

Estas ecuaciones relacionan el vector \vec{Q} con el ángulo de scattering.

Para el caso $\vec{G}_1 = \vec{G}_2 = \vec{0}$, correspondiente al



(a)



(b)

Figura 7 Diagrama de Ewald para rotación φ del blanco.

pico especular, las ecuaciones (6.11), (6.12) y (6.13) predicen un interesante efecto, ya mencionado en el capítulo 1. De estas ecuaciones se deduce la ecuación para Q

$$\begin{aligned} & \left[(\text{sen}^2 \theta + \text{sen}^2 \varphi \cos^2 \theta) \left(\frac{\alpha}{v_i} \right)^2 - 1 \right] Q^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar} \left[(\text{sen} \theta - \right. \\ & \left. - \text{sen} \theta_i) \text{sen} \theta + \text{sen}^2 \varphi \cos \theta (\cos \theta + \cos \theta_i) \right] Q + k_i^2 \left[(\text{sen} \theta - \right. \\ & \left. - \text{sen} \theta_i)^2 + \text{sen}^2 \varphi (\cos \theta + \cos \theta_i)^2 \right] = 0 \quad (6.14) \end{aligned}$$

Esta expresión rige en la vecindad del pico (0,0) y ha sido obtenida suponiendo isotropía ($\alpha_\mu = \alpha$). Como la relación (6.14) se dedujo para aniquilación de un fonón, su rango de validez es para $\theta < \theta_i$. Si $\varphi = 0$ (scattering en el plano de incidencia), (6.14) tiene raíces reales en todo el rango. Si $\varphi \neq 0$, las raíces son complejas en un entorno de θ_i , pasando a ser reales en cierto ángulo

$$\theta_r = \theta_r(\varphi, \theta_i, v_i, \alpha) \quad (6.15)$$

Como φ , θ_i y v_i son parámetros conocidos, la determi-

nación de θ_r permite conocer α . Hacer esto es, en principio, muy simple: basta medir el ángulo en las cercanías del pico elástico para el cual comienza a manifestarse intensidades inelásticas.

La curva con $\varphi = 2.3^\circ$ de las figuras 4 y 8 (tomada de los datos reportados por Williams (18)) presenta claramente el efecto que se considera, pero el máximo en 65° parece contradecir la aseveración de que Q no tiene raíces reales para $\theta = \theta_i$ y $\varphi \neq 0$. En la figura 6 se ve que la intensidad inelástica calculada en el plano de incidencia tiene un máximo centrado en $\theta_i = 65^\circ$; de este modo, aún para una dispersión angular incidente nula, un ensanchamiento de $\pm 2^\circ$ ocurre en la base del pico especular. Como la resolución experimental es $0,6^\circ$ a mitad de altura, se puede esperar que para $\varphi = 2,3^\circ$ algunas partículas que sufren scattering en el plano de incidencia sean detectadas cerca de $\theta_i = 65^\circ$. La rapidez relativa con que decrecen los máximos en $\theta_i = 65^\circ$ al aumentar φ es consistente con esta explicación. Williams discute en su trabajo una contribución de "mosaic spread" a estos máximos centrales.

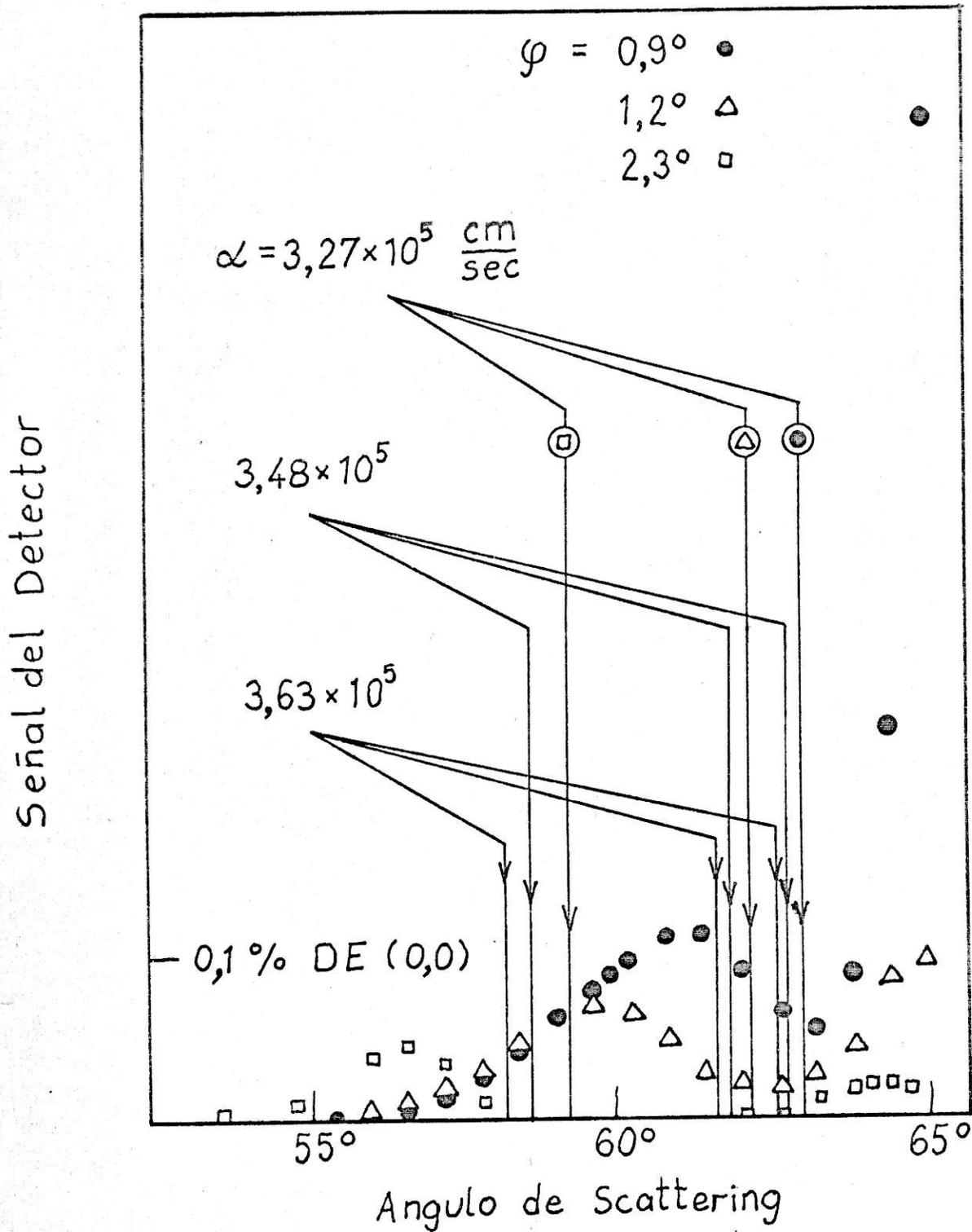


Figura 8 Datos experimentales de B. Williams para rotación φ del cristal. Las flechas apuntan a $\theta_p + \Delta$, para varios valores de α .

La tabla 1 muestra algunos valores de θ_r predichos por la ecuación (6.14) como función de la velocidad del sonido superficial α . Las flechas de la figura 8 apuntan a los valores de $\theta_r + \Delta$ para distintos valores de φ . El número Δ es el semi-ancho del detector y $\theta_r + \Delta$ son los ángulos en donde se espera ver el nacimiento de la intensidad inelástica, cuando el detector viene de θ_i .

Williams obtuvo un valor de α bajo la suposición $Q_1 = 0$, esto es, bajo la suposición que los máximos inelásticos observados provienen de una anisotropía en la dirección $\langle 100 \rangle$. Como en general $Q_1 \neq 0$ y $Q_2 = 0$ para $\varphi = 0$ (scattering en el plano de incidencia) y es efectivamente observada intensidad inelástica en el plano $\varphi = 0$, suponer que $Q_1 = 0$ y $Q_2 \neq 0$ para $\varphi \neq 0$ (hipótesis de Williams) implica la aceptación de una extraña discontinuidad en el plano de incidencia.

Este efecto parece constituir una buena manera de obtener α si se realiza el experimento en la forma óptima para la medición de los ángulos θ_r , pues la

ecuación (6.15) para α no depende de parámetros del potencial de interacción.

6.2 El experimento de Boato, Cantini y Mattera

En el capítulo 1 se describió el experimento de Boato, Cantini y Mattera, cuyos resultados se muestran en la figura 1. En 1970, Williams realizó un experimento similar (28) con una superficie de LiF (100) a temperatura de 150 K. Obtuvo un resultado cualitativamente muy parecido al de Boato et al., pero la intensidad de las componentes inelásticas eran comparables a las intensidades de difracción. La causa de esta gran intensidad inelástica se deduce de la ecuación (4.45), allí se ve que la sección eficaz de scattering inelástico es proporcional al cuadrado de la masa del átomo incidente. Es de esperar, por lo tanto, que al hacer incidir Ne sobre LiF se observe intensidades inelásticas del orden de 25 veces las intensidades inelásticas medidas en un experimento similar con He como partícula incidente.

La temperatura del blanco de LiF en el experimento de Boato et al. fue de 50 K, y sus resultados

TABLA 1

Algunos valores de θ_r en función de α y φ .

$\alpha \frac{\text{cm}}{\text{seg}}$ \diagdown φ	$0,9^\circ$	$1,2^\circ$	$2,3^\circ$
$3,27 \times 10^5$	$62,47^\circ$	$61,65^\circ$	$58,70^\circ$
$3,48 \times 10^5$	$62,24^\circ$	$61,33^\circ$	$58,15^\circ$
$3,63 \times 10^5$	$62,07^\circ$	$61,12^\circ$	$57,71^\circ$

son consistentes con las hipótesis de esta teoría. Una explicación muy interesante de los máximos en torno del pico especular (Fig. 1) se desprende de ella.

En la figura 1 se ve que los máximos de difracción de órdenes superiores son muy intensos. Luego los números $D_{\vec{G}}$ en la ecuación (4.45) no son pequeños para $\vec{G} \neq \vec{0}$, como ocurría para el caso del sistema He-LiF. Luego, en las sumas sobre \vec{G}' y \vec{G}'' no hay un término predominante como en ese caso. Como los vectores \vec{G}' y \vec{G}'' son importantes sólo en la relación entre \vec{p} y el ángulo de scattering θ , los términos con distintos \vec{G}' y \vec{G}'' tienen forma similar, pero presentando corrimientos unos respecto de otros. De esta forma se genera una serie de máximos, correspondiendo uno a cada término dominante de la suma sobre \vec{G}' y \vec{G}'' de la ecuación (4.45). La ubicación de esos máximos inelásticos contiene, sin duda, información sobre α y los parámetros del potencial de interacción Ne-LiF. La obtención de esa información queda, por el momento, propuesta.

REFERENCIAS

1. O. Stern, Naturwissenschaften 17 (1929)391.
2. I. Estermann y O. Stern, Z. Physik 61 (1930)95.
3. I. Estermann, R. Frisch y O. Stern, Z. Physik 73 (1931)348.
4. R. Frisch y O. Stern, Z. Physik 84 (1933)430.
5. R. Frisch, Z. Physik 84 (1933)443.
6. J.R. Bledsoe y S.S. Fisher, Surface Sci. 46 (1974)129.
7. K. Haberrecker, E. Mollwo, H. Schreiber, H. Hoinkes, H. Nahr, P. Lindner y H. Wilsch, Nucl. Instr. Methods 57 (1967)22.
8. A. Tsuchida, Surface Sci. 14 (1969)375.
9. N. Cabrera, V. Celli, F.O. Goodman y R. Manson, Surface Sci. 19 (1970)67.
10. M. Garibaldi, A.C. Levi, R. Spadacini y G.E. Tommei, Surface Sci. 48 (1975)649.

11. F.O. Goodman, Surface Sci. 19 (1970)92.
12. J.L. Beeby, J. Phys. C, 5 (1972)3438.
13. F.O. Goodman, Surface Sci. 26 (1971)327.
14. A.G. Stoll y R.P. Merrill, Surface Sci. 40
(1973)405.
15. D.V. Tendulkar y R.E. Stickney, Surface Sci.
27 (1971)516.
16. R.B. Subbarao y D.R. Miller, J. Vac. Sci.
Technol. 9 (1972)808.
17. F.O. Goodman, Surface Sci. 30 (1972)1.
18. B.R. Williams, J. Chem. Phys. 55 (1971)3220.
19. M. Lagos y L. Birstein, "Inelastic Scattering
of Atoms by Solid Surfaces"; será publi-
cado en Surface Science.
20. M. Lagos y L. Birstein, "Multiphonon Atomic
Scattering by Solid Surfaces; será publi-
cado en Surface Science.
21. M. Lagos, R. Venegas y M. Saffirio, "The Surface
Speed of Sound in LiF"; enviado para publi-
cación en Surface Science.

22. M. Born and K. Huang, "Dynamical Theory of Crystal Lattices" (Oxford University Press, London, 1957).
23. F.O. Goodman, J. Chem. Phys. 53 (1970)2281.
24. R.B. Subbarao y D.R. Miller, J. Vac. Sci. Technol. 9 (1972)808.
25. P. Morse, Phys. Rev. 34 (1939)57.
26. C.V. Briscoe y C.F. Squire, Phys. Rev. 106 (1957) 1175.
27. H. Hoinkes, H. Nahr y H. Wilsch, Surface Science 30 (1972)363.
28. B.R. Williams, J. Chem. Phys. 55 (1971)1315.