

UCH-FC
LIC-F
R173s

UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS BASICAS Y
FARMACEUTICAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

SOLUCION NUMERICA DEL SCATTERING
ELASTICO DE ATOMOS POR SUPERFICIES
CRISTALINAS



Tesis para optar al grado
de Licenciado en Ciencias
con mención en Física

Patrocinante: Dr. Herbert Massmann Leser

GIANCARLOS RAMIREZ RAZETO

1 9 8 1

UCH-FC
LIC-F
R173s

A Ruby Elisa, mi esposa.

a mis padres

La sabiduría está clamando fuera,
alza su voz en las plazas.

Clama encima de los muros, en las
entradas de las puertas de la ciudad,
y va diciendo:

¡Hasta cuándo simples, amareis
la simpleza, y, mofadores, os complacereis
en la petulancia, y aborreceréis, necios,
la ciencia?

(Proverbios I, 20-22)

AGRACEDIMIENTOS

Deseo agradecer el señor Herbert Massmann, mi Profesor Guía, la valiosa ayuda prestada al desarrollo de este trabajo.

También estoy muy reconocido al señor Jaime Rössler, y Miguel Lagos, por sus interesantes sugerencias acerca del tema de esta tesis y al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile, por el apoyo brindado durante mis estudios.

Debo asimismo, expresar mis agradecimientos a quienes conmigo trabajaron en este tema, el Licenciado Miguel Rivas y mi compañero Gilberto Urzúa.

INDICE DE MATERIAS

	Pág.
1. INTRODUCCION	1
2. FORMULACION DE SCATTERING ELASTICO	6
2.1 El Hamiltoniano	6
2.2 Las ecuaciones de canales acoplados	12
2.3 Las condiciones de borde	15
2.4 Solución de las ecuaciones de canales acoplados	17
3. SCATTERING SOBRE UNA SUPERFICIE CORRUGADA EN UNA DIRECCION	23
4. ESTUDIO DE LAS RESONANCIAS	37
4.1 Las resonancias y su explicación convencional	37
4.2 Rediagonalización del espectro ligado	42
5. COMPARACION DE RESULTADOS	60
5.1 Comparación con cálculos numéricos de otros autores	60
5.2 Comparación con otros métodos de solu ción	63
6. CONCLUSIONES	71
APENDICE A. Probabilidad de scattering	72
APENDICE B. Autovalores y autofunciones de un potencial de Morse	77
APENDICE C El Programa HEFLIQ2	84
REFERENCIAS	113

1. INTRODUCCION

El estudio de la interacción de átomos, que poseen energía en el rango térmico (10 - 100 meV), con superficies cristalinas se está constituyendo en una herramienta útil en el estudio de la estructura y dinámica de superficies.

Los primeros experimentos de este tipo fueron reportados por Esterman, Frisch y Stern [1-5], quienes hicieron incidir haces térmicos bien colimados de H y He sobre superficies limpias de NaCl y LiF. Sin embargo, el interés de estos investigadores no era el estudio de la superficie, sino más bien probar el comportamiento ondulatorio de las partículas del haz. El éxito obtenido no impidió que la realización de este tipo de experimentos fuera prácticamente abandonada hasta la década de 1960, época en que comienza a nacer un fuerte interés por el estudio de superficies sólidas.

A pesar de que no es fácil de producir ni de detectar un haz colimado de átomos neutros, como lo es uno de partículas cargadas, hoy en día existen buenos y recientes resultados experimentales [6-11]. Estos experimentos consisten esencialmente en hacer incidir un haz colimado de átomos neutros y energía bien definida sobre una superficie cristalina (haces experimentales recientes tienen para energías en el rango de 20 - 100 meV, variaciones de energía de un 1%). Las mediciones experimentales muestran haces emergentes en distintas

direcciones dadas por la ley de Bragg. La Figura 1 muestra el espectro obtenido al hacer incidir sobre una superficie de LiF (001), un haz de Ne con una energía de aproximadamente 58 meV formando un ángulo de 65° con el eje normal al plano $\langle 100 \rangle$ del cristal. El detector se mueve en el plano de incidencia, es decir, el plano engendrado por la normal y el haz incidente. En esta figura se indican con pares ordenados los vectores de red recíproca asociados a cada pico de Bragg. Los pequeños picos que se observan en torno al pico especular (vector de red $(0,0)$) son atribuidos a colisiones inelásticas.

Por otra parte, la teoría necesaria para relacionar los resultados experimentales con las magnitudes físicas que se desean conocer, ha demostrado grandes avances. Una recopilación reciente de los tratamientos teóricos y datos experimentales para el scattering de gases livianos (H, D, ^3He , ^4He y H_2) con superficies cristalinas se encuentra en la referencia [49]. Existe un gran interés en estudiar la dinámica superficial a través de la teoría del scattering inelástico, para lo cual se requiere previamente conocer la solución del problema elástico. Esto último precisamente es el objetivo central de esta tesis: Construir un programa computacional que permita obtener en forma numérica la solución del scattering elástico. Este programa computacional nos permitirá conocer

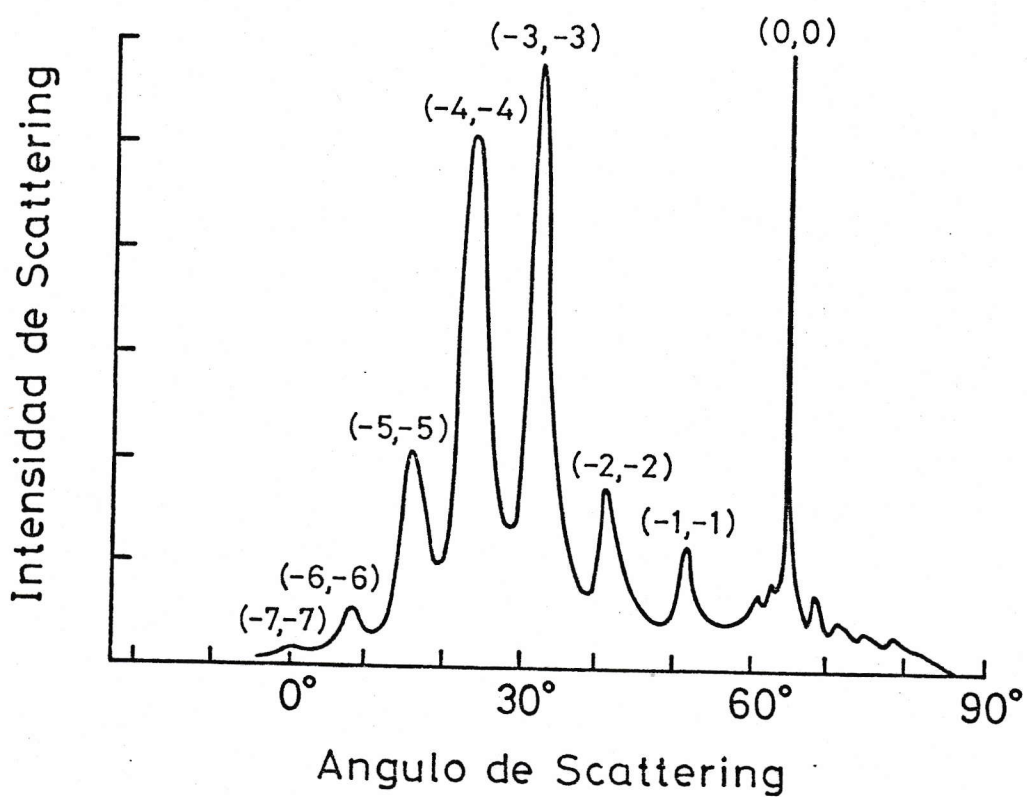


Figura 1. Scattering the Ne sobre LiF (001) en la dirección azimutal $\langle 100 \rangle$, para una temperatura superficial de 80°K, energía incidente $E \approx 58$ meV y ángulo incidente $\theta_i = 65^\circ$ [12].

la función de onda de la partícula que interactúa con la superficie y determinar la intensidad de los diferentes picos de difracción relativos al haz incidente. Con esta información podremos, en un trabajo posterior, abordar el estudio del scattering inelástico.

Códigos numéricos para abordar el problema elástico existen en unos pocos centros de investigación en el mundo; pero lamentablemente no pueden ser adquiridos comercialmente.

En el capítulo 2 del presente trabajo se muestra el desarrollo formal del algoritmo de solución consistiendo éste esencialmente en resolver unas ecuaciones diferenciales acopladas.

En el capítulo 3 se muestran los resultados obtenidos suponiendo una superficie "unidimensional" destacando un método para determinar el número de picos que poseen intensidades susceptibles de medirse experimentalmente.

En el capítulo 4 se hace un análisis del fenómeno de resonancias, fenómeno que se manifiesta en cambios bruscos en la intensidad de un pico de difracción al variar paulatinamente la energía o el ángulo de incidencia.

Finalmente, en el capítulo 5 se comparan nuestros resultados con los obtenidos por otros investigadores, comparación que muestra un buen acuerdo.

El programa computacional usado para obtener los

resultados que figuran en esta tesis se muestra en el apéndice C, en el que además se indica la forma de usarlo.

2. FORMULACION DEL SCATTERING ELASTICO

2.1 El Hamiltoniano

El objetivo de este capítulo es formular el problema de scattering elástico de átomos por superficies cristalin^as, de manera de poder encontrar las magnitudes de interés tales como la amplitud de los picos de difracción y la función de onda.

El potencial de interacción entre el átomo incidente y el cristal en principio debe contemplar las coordenadas tanto del núcleo del átomo incidente \vec{r} , como de los núcleos atómicos de los N átomos del cristal, \vec{r}_n , y también las posiciones de los electrones asociados al átomo incidente y al cristal, a este nivel la interacción es puramente coulombiana. Sin embargo, dado el enorme valor de la masa nuclear en comparación a la electrónica, así como la pequeña velocidad del átomo incidente en comparación a la velocidad electrónica, es completamente lícito efectuar la aprox. de Born-Oppenheimer reemplazándose el potencial coulombiano antes mencionado por un potencial efectivo núcleo-núcleo $V(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$.

La siguiente etapa consiste en notar que las posiciones de los átomos del cristal apenas oscilan de ciertos valores de equilibrio $\vec{r}_n = \vec{R}_n + \vec{u}_n$ con \vec{R}_n posición de equilibrio.

Esto permite aproximar

$$\begin{aligned}
 V(\vec{F}, \vec{F}_1, \dots, \vec{F}_N) \cong & V(\vec{F}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) + \sum_{i\alpha} U_{i\alpha} \left[\frac{\partial}{\partial r_{i\alpha}} V(\vec{F}, \vec{F}_1, \dots, \vec{F}_N) \right]_0 + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{i\alpha, j\beta} U_{i\alpha} U_{j\beta} \left[\frac{\partial^2}{\partial r_{i\alpha} \partial r_{j\beta}} V(\vec{F}, \vec{F}_1, \dots, \vec{F}_N) \right]_0 \quad (1)
 \end{aligned}$$

donde el substrito "0" indica que se está evaluando los derivados en las posiciones de equilibrio nuclear y $\alpha, \beta = x, y, z$ son las tres coordenadas espaciales. El primer término representa la interacción entre el átomo incidente y una superficie cristalina "rígida". El segundo término representa la interacción del átomo incidente con las vibraciones del cristal o fonones. Este segundo término rige la llamada interacción inelástica y describe tanto procesos de absorción como de emisión de fonones. Cuando el átomo incidente está suficientemente lejos del cristal este término se anula dada la condición que los \vec{R}_i son posiciones de equilibrio.

El término cuadrático rige el acoplamiento elástico entre los átomos del cristal e indica como éste es influenciado por la cercanía del átomo incidente.

En el presente trabajo no nos interesan los grados de libertad \vec{U}_i (aproximación elástica), de modo que si se efectúa un promedio térmico sobre ellos mediante la matriz densidad de fonones del cristal aislado (sin perturbar por el

átomo incidente); tal promedio térmico lleva a un potencial efectivo que describe la interacción entre un cristal "rígido" y un átomo que incide sobre su superficie.

El procedimiento recién descrito fue introducido por Cabrera *et al.* [13] y M. Lagos [14].

En la práctica no es fácil evaluar esta aproximación, por lo cual se suele trabajar con potenciales semi-empíricos. Estos potenciales empíricos son necesariamente periódicos con la periodicidad de la red superficial, constan de una parte atractiva y otra repulsiva, y sólo dependen de las coordenadas de la partícula incidente, $\vec{r} = (x, y, z)$.

En el presente trabajo, si bien el tratamiento numérico es general, usaremos un potencial empírico propuesto por Lenard-Jones y Devonshire [15] que, suponiendo el eje \hat{z} perpendicular a la superficie, es de la forma

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &= V(x, y, z) \\ &= V_0(z) + \beta V_1(z) \left[\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right] \end{aligned} \quad (2),$$

donde

$$V_0(z) = D e^{\alpha(z_0-z)} \left[e^{\alpha(z_0-z)} - 2 \right] \quad (3)$$

es un potencial de Morse y

$$V_1(z) = -2D e^{2\alpha(z_0-z)} \quad (4)$$

En la ecuación (2) el parámetro β mide la "rugosidad" de la superficie, es decir el grado de dependencia de $V(\vec{r})$ en x , y . Para $\beta=0$, la superficie no muestra rugosidad ($V(\vec{r})=V(z)$) y en tal caso se conservan los componentes del momento paralelo a la superficie siendo toda la dispersión de los átomos especular.

La Figura 2 muestra la forma del potencial para los parámetros indicados en la Tabla 1, que corresponden al caso específico de scattering de átomos de Helio sobre una superficie de Fluoruro de Litio [16-17] .

Sea M la masa y E la energía de la partícula incidente. Entonces con las consideraciones precedentes, el Hamiltoniano en la representación de coordenadas viene dado por

$$H = - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V(\vec{r}) \quad (5)$$

Luego, la ecuación de Schrödinger a resolver es

$$[\nabla^2 + k^2 - U(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (6)$$

donde \vec{k} es el vector de onda de la partícula incidente y

$$U(\vec{r}) = \frac{2M}{\hbar^2} V(\vec{r}) \quad (7)$$

acá la energía es
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (8)$$

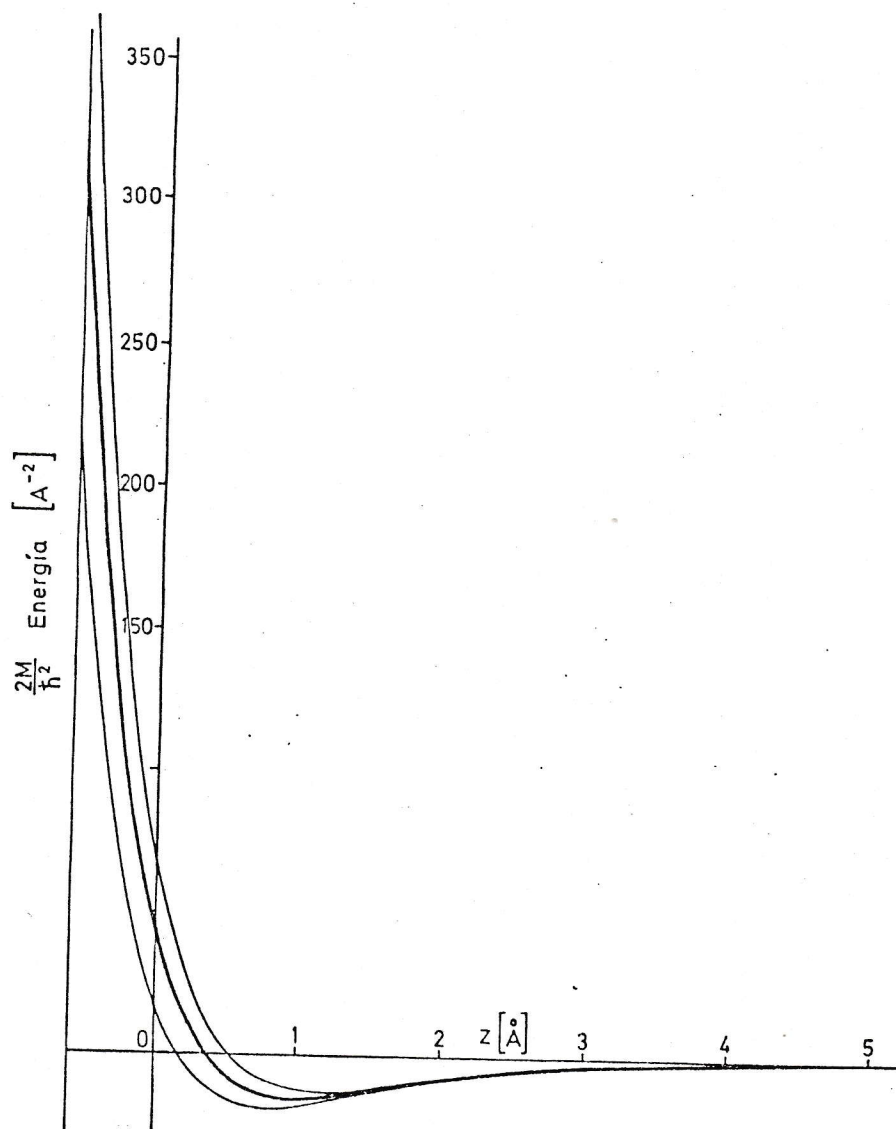


Figura 2. Potencial de Morse $V_0(z)$, (línea gruesa) según los parámetros de la Tabla 1. Los "extremos" $V_0(z) \pm \beta V_1(z)$ del potencial para $\beta = 0.1$ están indicados por líneas delgadas.

TABLA 1

Parámetros del potencial $V(\vec{r})$ usados en el presente trabajo para el Scattering de He sobre la superficie $\text{LiF}\langle 100 \rangle$

Parámetro	Valor	Significado
a	2.84 Å	Parámetro de la red cristalina
D	-7.63 meV	Valor mínimo del potencial
z_0	1.0 Å	Posición del mínimo del potencial
α	1.0 Å	α^{-1} es el "alcance" del potencial
β	(0.06-0.1)	Medida de la rugosidad de la superficie

2.2 Las ecuaciones de canales acoplados.

El hecho de que el potencial de interacción sea periódico sugiere hacer una expansión de Fourier, es decir

$$U(x, y, z) = \sum U_n(z) e^{i \vec{G}_n \cdot \vec{R}} \quad (9)$$

donde

$$\vec{R} = \vec{r} - \vec{r} \cdot \hat{z}$$

es la componente de \vec{r} sobre el plano cristalino, y además se han introducido los vectores \vec{G}_n de la red (superficial) recíproca*. Los términos U_n se obtienen integrando sobre la celda unitaria de área A , de la red superficial

$$U_n(z) = \frac{1}{A} \int_{c.u.} U(\vec{r}) e^{-i \vec{G}_n \cdot \vec{R}} dx dy. \quad (11)$$

Dada la periodicidad del sistema en la dirección (x, y) podemos usar el Teorema de Bloch para $\Psi(\vec{r})$, obteniéndose

(*) En el caso de una red cúbica y una superficie perpendicular a una dirección principal $\vec{G}_n = \frac{2\pi}{a} (\mu \hat{x} + \nu \hat{y})$, donde a es la distancia entre sitios de la red.

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n \psi_n(z) e^{i(\vec{k} + \vec{G}_n) \cdot \vec{R}} \quad (12)$$

donde

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k} \cdot \hat{z} \quad (13)$$

es la componente de \vec{k} sobre el plano cristalino.

Reemplazando las expansiones (9) y (12) en la ecuación de Schrödinger (6) se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{n'} e^{i(\vec{K} - \vec{G}_{n'}) \cdot \vec{R}} \left(k^2 - (\vec{K} + \vec{G}_{n'})^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{n'}(z) = \\ = \sum_{nn'} e^{i(\vec{K} + \vec{G}_n + \vec{G}_{n'}) \cdot \vec{R}} U_n(z) \psi_{n'}(z). \end{aligned} \quad (14)$$

Multiplicando (14) por $e^{-i(\vec{K} + \vec{G}_{n'}) \cdot \vec{R}}$, integrando sobre la celda unitaria bidimensional y usando la relación de ortogonalidad

$$\frac{1}{A} \int_{c.u.} e^{i(\vec{G}_n - \vec{G}_{n'}) \cdot \vec{R}} dx dy = \delta_{nn'} \quad , \quad (15)$$

se obtiene

$$\left(k^2 - (\vec{K} + \vec{G}_n)^2 + \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi_n(z) = \sum_{n'} U_{n-n'}(z) \psi_{n'}(z) \quad (16)$$



donde

$$U_{n-n'}(z) = U_{(\vec{G}_n - \vec{G}_{n'})}(z). \quad (17)$$

Las ecuaciones (16) se pueden expresar como un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\varphi_n(z)}{dz} = \varphi_n'(z) \end{array} \right. \quad (18a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\varphi_n'(z)}{dz} = \sum_{n'} B_{nn'}(z) \varphi_{n'}(z) \end{array} \right. \quad (18b)$$

donde la matriz $B_{nn'}$ viene definida por

$$B_{nn'}(z) = U_{n-n'}(z) - \delta_{nn'} k_n^2. \quad (19)$$

En la ecuación (19) se ha introducido la notación

$$k_n^2 = k^2 - (\vec{K} + \vec{G}_n)^2. \quad (20)$$

La magnitud $\frac{\hbar^2 k_n^2}{2M}$ es la energía cinética de la partícula en la dirección \hat{z} , si esta se encuentra en el canal n .

La magnitud k_n^2 puede tomar valores positivos o negativos dependiendo del vector de red recíproca \vec{G}_n al cual está asociado.

Se dirá que el canal n es un "canal cerrado" si $k_n^2 < 0$, en caso contrario, se dirá que el canal es "abierto".

Aunque los canales cerrados no pueden ser observados en la zona de scattering ($z \rightarrow +\infty$), no por eso deben ser descartados, por el contrario, los canales cerrados pueden contribuir significativamente en el proceso de scattering.

2.3 *Las condiciones de borde*

Encontrar soluciones a las ecuaciones (16) en forma numérica es fácil; la dificultad radica en encontrar la función de onda que satisfaga las condiciones de borde correctas correspondientes al problema físico aquí planteado.

La función de onda (12) tiene que satisfacer las siguientes condiciones de borde:

$$i) \quad \Psi(\vec{r}) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} 0 \quad (21)$$

es decir, las partículas incidentes no penetran hacia en interior del cristal.

ii) Para $z \rightarrow +\infty$ se deben tener ondas planas emergentes en todas las direcciones permitidas por la ley de Bragg y una onda plana incidente en la dirección del haz atómico.

Estas condiciones son equivalentes a las siguientes condiciones sobre los $\varphi_n(z)$ de la ecuación (12)

$$a) \quad \varphi_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} 0 \quad (22)$$

$$b) \quad \varphi_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} A_n e^{i k_n z} + \delta_{n \nu_0} e^{-i k_n z} \quad (23)$$

si n es un canal abierto, y

$$\varphi_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} A_n e^{-\chi_n z} \quad (24)$$

si n es un canal cerrado.

Aquí ν_0 indica el canal especular y χ_n viene dado por

$$\chi_n = \sqrt{-k_n^2} \quad (25)$$

Para resolver las ecuaciones (17) numéricamente, las condiciones de borde tienen que ser impuestas para valores finitos de z .

En lugar de $\varphi_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} 0$, requerimos que

$$\varphi_n(z_i) = 0 \quad (26)$$

donde $z_i < 0$ es un lugar en el interior del cristal. Esto es equivalente a cambiar el potencial original de manera que en $z = z_i$ se encuentre una barrera dura

$$V(\bar{r}) = \begin{cases} +\infty & z \leq z_i \\ V_0(z) + \beta V_1(z) \left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \right] & z > z_i \end{cases} \quad (27)$$

Esta modificación no debería influir en el resultado del cálculo numérico, si el valor z_i es elegido de manera que la energía de la partícula incidente sea mucho menor que el valor que toma el potencial en z_i .

También para grandes valores de z , la integración de las ecuaciones de canales acoplados debe realizarse hasta un valor finito z_a donde el potencial $V(\vec{r})$ es esencialmente cero. La ecuación de Schrödinger del canal n para $z \gg z_a$ es aproximadamente

$$\frac{d^2}{dz^2} \varphi_n(z) \cong -k_n^2 \varphi_n(z). \quad (28)$$

Luego, las soluciones para $z \gg z_a$ serán las ecuaciones (23) y (24) para canales abiertos y cerrados respectivamente.

2.4 Solución de la ecuación de canales acoplados [18]

Sea

$$\psi_\mu(x, y, z) = \sum_\nu \varphi_{\nu\mu}(z) e^{i(\vec{k} + \vec{G}_\nu) \cdot \vec{R}} \quad (29)$$

solución de (6) con las siguientes condiciones de borde en

$$\varphi_{\nu\mu}(z_i) = 0 \quad (30a)$$

$$\varphi'_{\nu\mu}(z_i) = \delta_{\nu\mu} \Gamma_{\mu} \quad , \quad \forall \mu, \nu \quad (30b)$$

donde los Γ_{μ} son constantes arbitrarias no nulas.

Para cada μ (tomando μ como un parámetro), conociendo (30), integramos las ecuaciones de canales acoplados (16) partiendo de z_i hasta z_a .

Para valores de $z \geq z_a$, debido a que $V(\bar{F}) \approx 0$, las funciones $\varphi_{\nu\mu}$ deben ser de la forma

$$\varphi_{\nu\mu}(z) = a_{\mu\nu} e^{ik_{\nu}z} + b_{\mu\nu} e^{-ik_{\nu}z} \quad (31a)$$

si ν es un canal abierto, y

$$\varphi_{\nu\mu}(z) = a_{\mu\nu} e^{-\chi_{\nu}z} + b_{\mu\nu} e^{\chi_{\nu}z} \quad (31b)$$

si ν es un canal cerrado.

Entonces en $z=z_a$, derivando las ecuaciones anteriores, se tienen las siguientes relaciones

$$\begin{cases} \varphi_{\nu\mu}(z_a) = a_{\mu\nu} e^{ik_{\nu}z_a} + b_{\mu\nu} e^{-ik_{\nu}z_a} \\ \varphi'_{\nu\mu}(z_a) = i a_{\mu\nu} k_{\nu} e^{ik_{\nu}z_a} - i b_{\mu\nu} k_{\nu} e^{-ik_{\nu}z_a} \end{cases} \quad (32a)$$

si ν es un canal abierto, y

$$\begin{cases} \varphi_{\nu\mu}(z_a) = a_{\mu\nu} e^{-\chi_{\nu}z_a} + b_{\mu\nu} e^{\chi_{\nu}z_a} \\ \varphi'_{\nu\mu}(z_a) = -a_{\mu\nu} \chi_{\nu} e^{-\chi_{\nu}z_a} + b_{\mu\nu} \chi_{\nu} e^{\chi_{\nu}z_a} \end{cases} \quad (32b)$$

si ν es un canal cerrado.

Despejando estos sistemas de ecuaciones se obtiene

$$a_{\mu\nu} = \frac{e^{-ik_\nu z_a}}{2ik_\nu} \left[\varphi'_{\mu\nu}(z_a) + ik_\nu \varphi_{\mu\nu}(z_a) \right] \quad (33a)$$

$$b_{\mu\nu} = \frac{e^{ik_\nu z_a}}{2ik_\nu} \left[ik_\nu \varphi_{\mu\nu}(z_a) - \varphi'_{\mu\nu}(z_a) \right] \quad (33b)$$

si ν es un canal abierto, y

$$a_{\mu\nu} = \frac{e^{\chi_\nu z}}{2\chi_\nu} \left[\varphi'_{\mu\nu}(z_a) - \chi_\nu \varphi_{\mu\nu}(z_a) \right] \quad (34a)$$

$$b_{\mu\nu} = \frac{e^{-\chi_\nu z}}{-2\chi_\nu} \left[\varphi'_{\mu\nu}(z_a) + \chi_\nu \varphi_{\mu\nu}(z_a) \right] \quad (34b)$$

si ν es un canal cerrado.

La solución que se busca debe ser una combinación lineal de las funciones $\psi_\mu(\vec{r})$, que son linealmente independientes por las condiciones (30)

$$\bar{\Phi}_{\nu_0}(x, y, z) = \sum_{\mu} C_{\nu_0\mu} \psi_\mu(x, y, z). \quad (35)$$

La función $\bar{\Phi}_{\nu_0}$ satisface la condición de borde $\bar{\Phi}_{\nu_0}(\vec{r}, z_i) = 0$ ya que cada una de las funciones ψ_μ es nula en $z = z_i$.

Para $z \geq z_a$ se encuentra que

$$\begin{aligned} \Phi_{\nu_0}(x, y, z) &= \sum_{\mu} c_{\nu_0 \mu} \psi_{\nu \mu}(z) e^{i(\vec{k} + \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R}} \\ &= \sum_{\substack{\mu \\ \nu \text{ abiertos}}} (c_{\nu_0 \mu} a_{\mu \nu} e^{ik_{\nu} z} + c_{\nu_0 \mu} b_{\mu \nu} e^{-ik_{\nu} z}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R}} + \\ &+ \sum_{\substack{\mu \\ \nu \text{ cerrados}}} (c_{\nu_0 \mu} a_{\mu \nu} e^{-\chi_{\nu} z} + c_{\nu_0 \mu} b_{\mu \nu} e^{\chi_{\nu} z}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R}}. \end{aligned} \quad (36)$$

De aquí se obtiene que Φ_{ν_0} satisface las condiciones de borde en $z = z_a$ (23) y (24), si y sólo si

$$\sum_{\mu} c_{\nu_0 \mu} b_{\mu \nu} = \delta_{\nu \nu_0}. \quad (37)$$

En otras palabras, la matriz (c) es la inversa de la matriz (b).

Usando (36) y (37), se obtiene que

$$\begin{aligned} \Phi_{\nu_0}(x, y, z) &= e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - k_{\nu_0} z)} + \sum_{\substack{\nu \\ \nu \text{ abiertos}}} A_{\nu \nu_0} e^{ik_{\nu} z} e^{i(\vec{k} + \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R}} + \\ &+ \sum_{\substack{\nu \\ \nu \text{ cerrados}}} A_{\nu \nu_0} e^{-\chi_{\nu} z} e^{i(\vec{k} + \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R}}, \end{aligned} \quad (38)$$

donde $A_{\nu \nu_0}$ viene dado por

$$A_{\nu \nu_0} = \sum_{\mu} c_{\nu_0 \mu} a_{\mu \nu}. \quad (39)$$

Para $z \gg z_a$ las funciones exponencialmente decrecientes tienden rápidamente a cero, obteniéndose finalmente que

$$\Phi_{\nu_0}(\vec{R}, z) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - k_{\nu_0} z)} + \sum_{\nu \text{ abiertos}} A_{\nu_0 \nu} e^{i[(\vec{k} + \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R} + k_{\nu} z]} \quad (40)$$

A partir de (40) se obtiene que la probabilidad de que una partícula incidente por el canal $\nu = \nu_0$ emerja por el canal ν viene dada por (ver Apéndice A):

$$P_{\nu} = \frac{k_{\nu}}{k_{\nu_0}} |A_{\nu_0 \nu}|^2 \quad (41)$$

El factor que acompaña a $|A_{\nu_0 \nu}|^2$ en la ecuación (41) tiene una interpretación geométrica (Fig. 3); es la razón entre el ancho de los frentes de onda incidente y emergente.

Por supuesto se tiene la condición de normalización

$$\sum_{\nu \text{ abiertos}} P_{\nu} = \sum_{\nu \text{ abiertos}} \frac{k_{\nu}}{k_{\nu_0}} |A_{\nu_0 \nu}|^2 = 1 \quad (42)$$

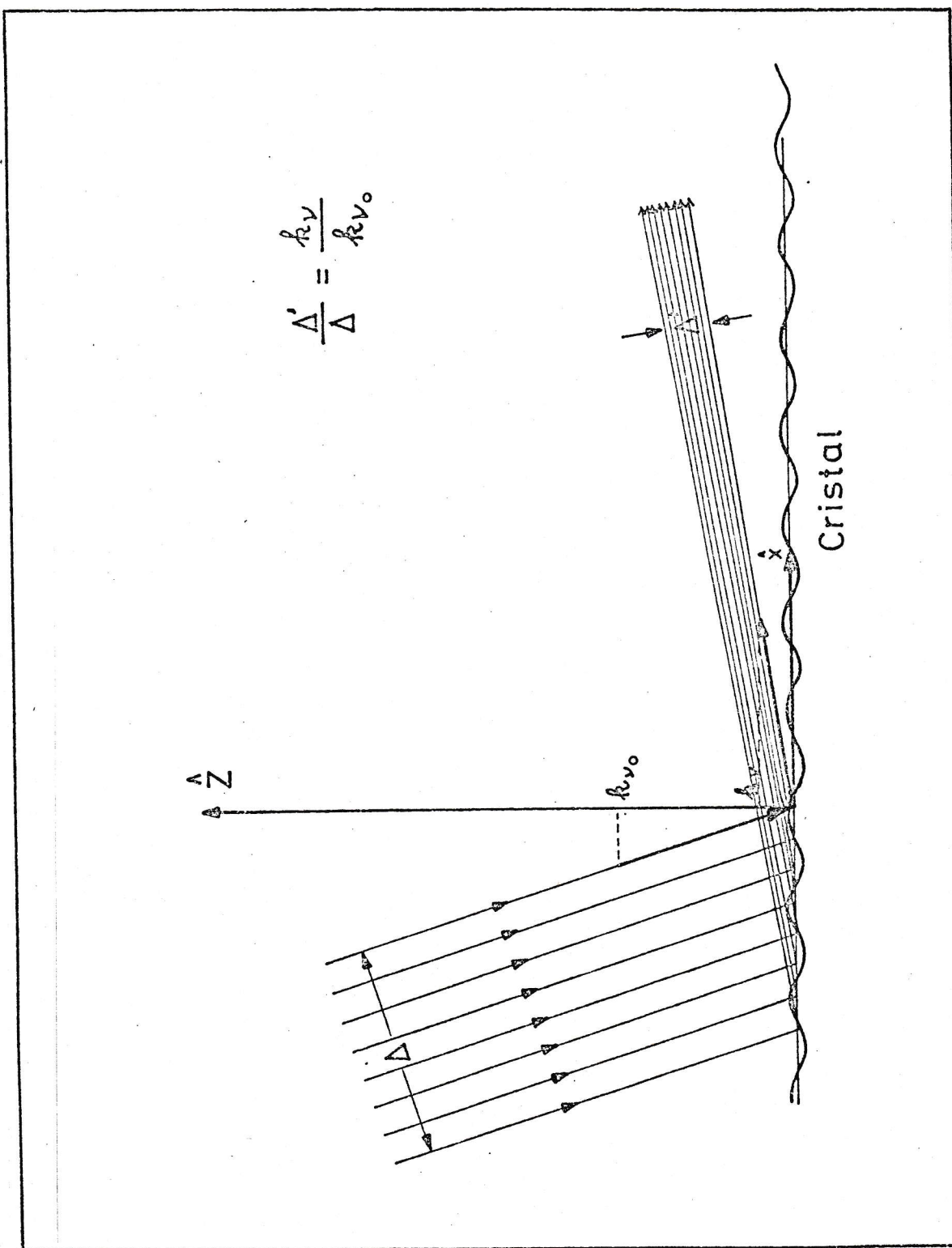


Figura 3. Gráfico que muestra en forma esquemática la relación geométrica entre el ancho del fuerte de ondas incidentes y emergentes para el scattering de átomos por superficies.

3. SCATTERING SOBRE UNA SUPERFICIE CORRUGADA EN UNA DIRECCION

En este capítulo se estudiará el scattering elástico de átomos que inciden sobre una superficie corrugada solamente en una dirección.

Este estudio se hace para determinar mediante un modelo simplificando las dificultades numéricas como la precisión, el tiempo de ejecución, el número de canales que deben ser incluidos en cada cálculo, y los mejores valores para parámetros tales como Z_i y Z_a .

En este capítulo usaremos el potencial (2.2) del capítulo 2, para la interacción He-LiF con rugosidad sólo en la dirección x ,

$$V(x,z) = V_0(z) + \beta V_1(z) \cos\left(\frac{2\pi}{a} x\right) \quad (1)$$

Suponer rugosidad en una dirección es formalmente equivalente a considerar una "superficie unidimensional". En este caso la ecuación de Schrödinger del sistema es

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,z) - E \right] \psi(x,z) = 0 \quad (2)$$

Las expansiones (2.9) y (2.12) en este caso se transforman en

$$U(x,z) = \sum_n U_n(z) e^{ig_n x} \quad (3)$$

y

$$\Psi(x,z) = \sum_n \varphi_n(z) e^{i(k_x + g_n)x} \quad (4)$$

donde

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (5)$$

y

$$\vec{k} = (k_x, k_z). \quad (6)$$

Para los vectores de la red recíproca unidimensional g_n se obtiene

$$g_n = \frac{2\pi n}{a}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (7)$$

donde a es el espaciado de la red.

Los términos $U_n(z)$ de la expansión (3) para el potencial (1) vienen dados por

$$U_0(z) = \frac{2M}{\hbar^2} V_0(z) \quad (8)$$

$$U_{\pm 1}(z) = \frac{M}{\hbar^2} V_1(z) \quad (9)$$

$$U_m(z) = 0 \quad \forall m \neq 0, \pm 1. \quad (10)$$

Luego, con estas consideraciones, las ecuaciones de canales acoplados quedan

$$\frac{d^2 \varphi_n(z)}{dz^2} = \sum_{n'} B_{nn'}(z) \varphi_{n'}(z) \quad (11)$$

donde

$$B_{nn'}(z) = U_{n-n'}(z) - \delta_{nn'} k_n^2 \quad (12)$$

y los k_n^2 vienen dados por

$$k_n^2 = k^2 - (k_x + g_n)^2. \quad (13)$$

La Figura 4, que es una ampliación de la Figura 2, muestra el potencial de interacción. En este gráfico se observa que para $z \geq 2.5 \text{ \AA}$, V_1/V_0 es esencialmente cero. Luego, tenemos que para $z \geq z_f = 2.5 \text{ \AA}$ la ecuación de Schrödinger para el canal n es esencialmente

$$\frac{d^2 \varphi_n(z)}{dz^2} \approx (U_0 - k_n^2) \varphi_n(z), \quad (14)$$

es decir, para $z \geq z_f$ las ecuaciones (11), para distintos valores de n , se desacoplan.

Luego, las funciones $\varphi_{\mu\nu}$ de la ecuación (2.29), en $z = z_f$ deben tener la forma

$$\varphi_{\mu\nu}(z_f) = a_{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{\rightarrow}(z_f) + b_{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{\leftarrow}(z_f) \quad (15a)$$

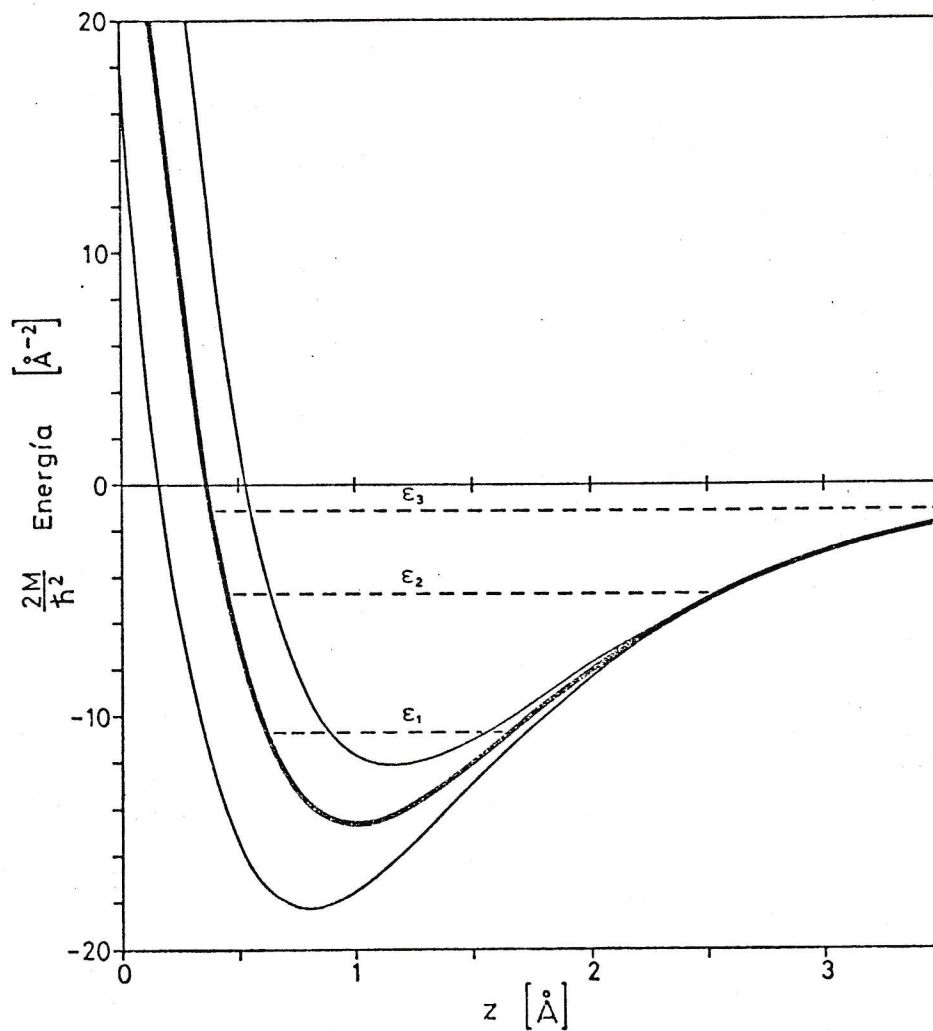


Figura 4. Ampliación de la Figura 2. Las líneas cortadas indican los estados ligados ϵ_i del potencial de Morse.

si ν es un canal abierto, y

$$\varphi_{\mu\nu}(z_f) = a_{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{\downarrow}(z_f) + b_{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{\uparrow}(z_f) \quad (15b)$$

si ν es un canal cerrado, donde las funciones $\varphi^{\rightarrow}, \varphi^{\leftarrow}, \varphi^{\downarrow}$ y φ^{\uparrow} satisfacen la ecuación de Schrödinger (14) con las condiciones de borde

$$\varphi_{\nu}^{\rightarrow}(z) \xrightarrow{z \geq z_a} e^{ik_{\nu}z} \quad (16a)$$

$$\varphi_{\nu}^{\leftarrow}(z) \xrightarrow{z \geq z_a} e^{-ik_{\nu}z} \quad (16b)$$

$$\varphi_{\nu}^{\uparrow}(z) \xrightarrow{z \geq z_a} e^{\chi_{\nu}z} \quad (16c)$$

$$\varphi_{\nu}^{\downarrow}(z) \xrightarrow{z \geq z_a} e^{-\chi_{\nu}z} \quad (16d)$$

Todo esto nos permite integrar el sistema de ecuaciones acopladas desde Z_i hasta Z_f realizándose ahí el ensamble con las funciones $\varphi^{\rightarrow}, \varphi^{\leftarrow}, \varphi^{\uparrow}$ y φ^{\downarrow} que se obtienen integrando las ecuaciones de Schrödinger desacopladas (14) desde Z_a hasta Z_f obteniéndose así las matrices $a_{\mu\nu}$ y $b_{\mu\nu}$ usando expresiones análogas a las ecuaciones (33) y (34) del capítulo 2, pero reemplazando las exponenciales por las funciones $\varphi^{\rightarrow}, \varphi^{\leftarrow}, \varphi^{\uparrow}$ y φ^{\downarrow} .

Con este procedimiento se evita en gran parte el problema numérico que surge en los canales cerrados debido a que en éstos la función de onda crece exponencialmente. Además, mientras más largo es el intervalo en que se integran las ecuaciones de canales acoplados, más precisión se requiere en la rutina de integración, con el consiguiente gasto de tiempo de computador.

La Tabla 2 muestra cálculos numéricos realizados usando 5 canales ($n = 2, -1, 0, 1, 2$), donde el canal $n = 2$ es un canal cerrado. En esta tabla se muestran las intensidades de los canales abiertos obtenidos para distintos valores de z_i, z_a, z_f , usando en todos los casos la misma precisión en las rutinas de integración. De aquí en adelante, se usarán en este tesis los valores $z_i = -0.6 \text{ \AA}$, $z_f = 2.5 \text{ \AA}$ y $z_a = 6.0 \text{ \AA}$.

Para realizar un cálculo, es necesario determinar el número de canales que deben ser considerados, es decir, cuántos y cuáles canales abiertos alcanzar una intensidad susceptible de medir experimentalmente y qué canales cerrados contribuyen significativamente al proceso.

La rugosidad de la superficie es el factor que determina el número de canales que se deben incluir en un cálculo, ya que ésta provee los términos de acoplamiento en la ecuación de Schrödinger.

TABLA 2.

Intensidad de los picos de difracción para cálculos con 5 canales ($n=-2, 1, 0, 1, 2$), donde $n=2$ es un canal cerrado, energía incidente 20 meV, ángulo incidente 30° , $\beta = 0,1$

Caso N°	PARAMETROS DE INTEGRACION			INTENSIDAD POR CANAL					Intensidad total	Tiempo de Ejecución
	Zi	Zf	Za	-2	-1	0	1			
1	-0.6	2.5	6.0	0.3183	0.3305	0.1098	0.2416	1.0001	3.2 seg	
2	-0.9	2.5	6.0	0.3182	0.3304	0.1097	0.2417	1.0000	5.8 seg	
3	-0.6	3.5	6.0	0.3187	0.3283	0.1096	0.2436	1.0002	3.4 seg	
4	-0.6	6.0	6.0	0.3090	0.3117	0.0960	0.2355	0.9523	3.6 seg.	
5	-0.6	2.5	7.0	0.3183	0.3306	0.1089	0.2423	1.0001	3.6 seg.	
6	-0.3	2.5	6.0	0.2999	0.3419	0.1193	0.2412	1.0024	2.3 seg.	

Angulos emergentes para los distintos canales

Canal	-2	-1	0	1
Angulo	-12.43°	8.19°	30°	59.05°

La Figura 5, muestra la intensidad de los distintos picos de difracción (canales) para distintos valores de β (rugosidad). Las líneas llenas muestran las intensidades para el caso en que se consideran 4 canales, todos ellos abiertos ($n = -2, -1, 0, 1$), y la línea cortada para el caso de 5 canales ($n = -2, -1, 0, 1, 2$), donde el canal $n = 2$ es un canal cerrado. Notamos que para valores de β entre 0.0 y 0.06 el incluir el canal cerrado no afecta los resultados.

Las Figuras 6 y 7 muestran en forma comparativa los ca sos en que se han incluido 5 y 6 canales y 6 y 7 canales, respectivamente.

En estos cálculos no se incluyó el canal cerrado $n = +3$ pues la energía $\frac{\hbar^2 k_{+3}^2}{2M}$ toma valores muy por debajo del mí nimo del potencial.

En las Figuras 5, 6 y 7 se observa, para el caso parti cular aquí considerado, que para valores de β entre 0.0 y 0.03 sólo son significativos los picos de primer orden ($n = +1, -1$). Las intensidades de segundo orden ($n = +2, -2$) son significativas recién a partir de $\beta > 0.03$, las de tercer orden ($n = 3$) a partir de $\beta > 0.12$ y las intensidades de cuarto orden ($n = 4$) para $\beta > 0.17$.

La Figura 8 muestra en forma esquemática los procesos o pasos que la partícula incidente debe seguir para emerger en un canal dado. A medida que se va aumentando la

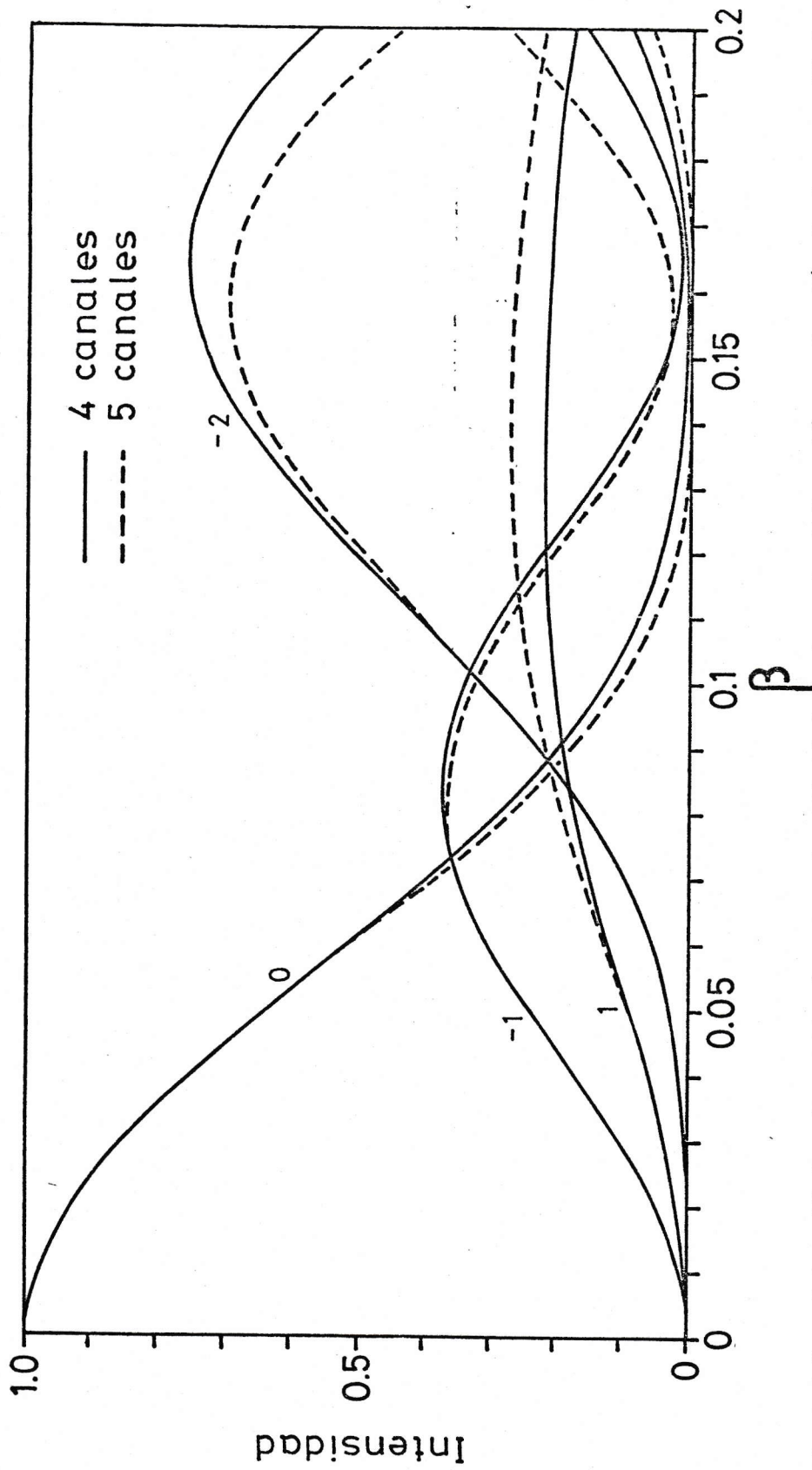


Figura 5. Intensidades de scattering para los distintos picos de difracción en función de la rugosidad de la superficie β . Con línea llena se indican los resultados con 4 canales ($n = -2, -1, 0, 1$) y con línea cortada los resultados con 5 canales ($n = -2, -1, 0, 1, 2$), donde el canal $n=2$ es cerrado, la longitud de onda de las partículas incidentes corresponden a átomos de He de 20 meV. El ángulo de incidencia es $\theta = 30^\circ$.

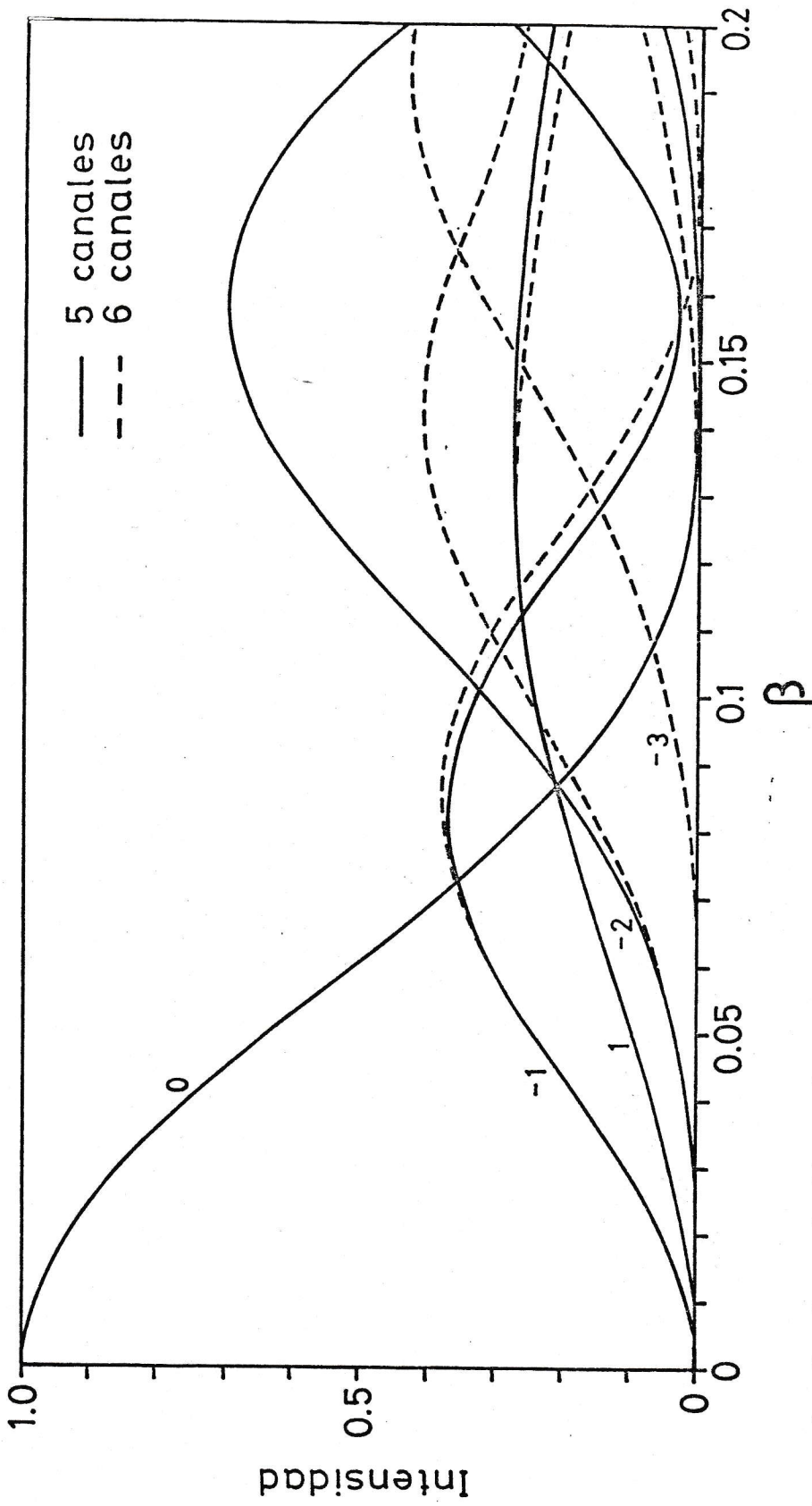


Figura 6. Igual que la Figura 5 pero para el caso de 5 canales ($n = -2, -1, 0, 1, 2$) y 6 canales ($n = -3, -2, -1, 0, 1, 2$) donde el canal $n = 2$ es cerrado.

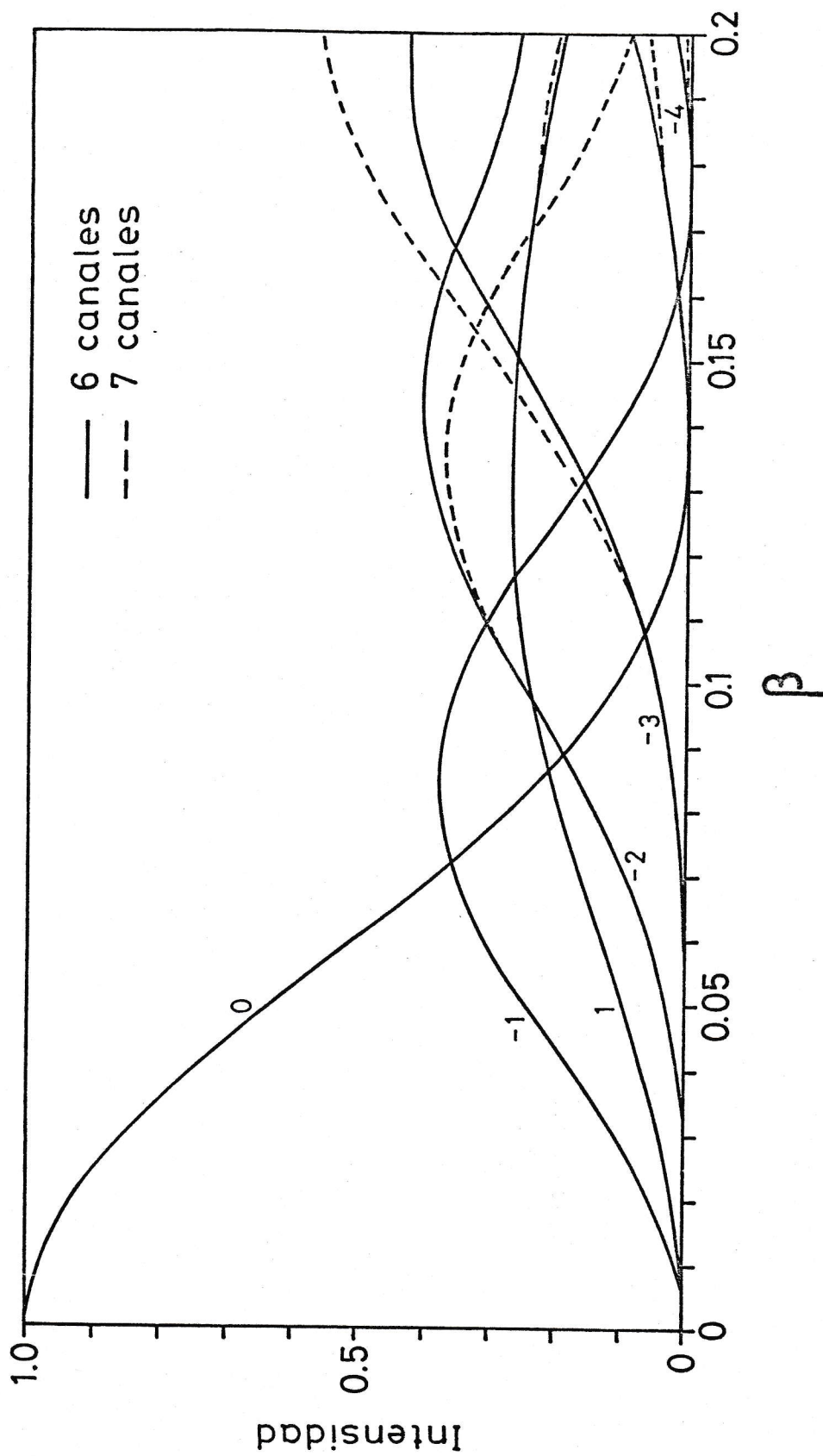


Figura 7. Igual que en la Figura 5 pero con 6 canales ($n = -3, -2, -1, 0, 1, 2$) y 7 canales ($n = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2$), donde el canal $n = 2$ es un canal cerrado.

rugosidad de la superficie, también aumenta el número de pasos y por lo tanto, el número de canales que contribuyen al proceso de scattering.

Es interesante notar que hay muchos fenómenos en física que son formalmente idénticos al presente problema, es decir, son regidos por sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas similares a las ecuaciones (2.18). Por ejemplo, en el estudio de la excitación Coulombiana de estados rotacionales en núcleos deformados, se obtienen figuras (ver Figura 9), similares a las Figuras 5-7.

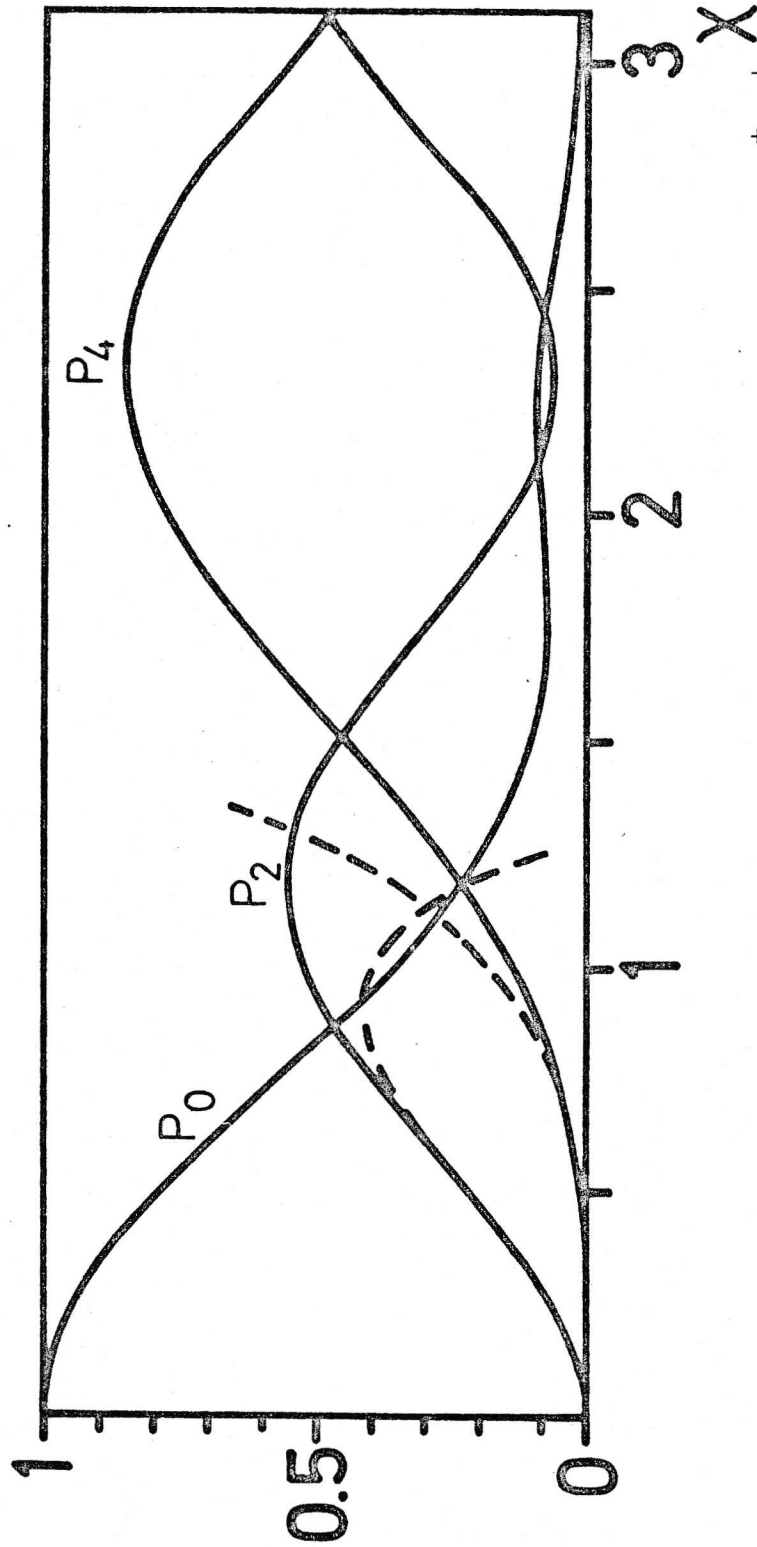


Figura 9. Probabilidad para la excitación múltiple de los estados rotacionales 0^+ , 2^+ y 4^+ en núcleos deformados mediante excitación Coulombiana. La figura muestra los resultados en función del parámetro de "deformación" X para un cálculo en que se incluyeron 3 de estos estados. (La línea cortada indica los resultados de la teoría de perturbaciones a segundo orden). Note la gran similitud de esta figura con las anteriores.

4. ESTUDIO DE LAS RESONANCIAS

4.1 *Las resonancias y su explicación convencional*

Una de las características típicas que se observan, tanto en mediciones como en cálculos teóricos, son las llamadas resonancias. La Figura 10 muestra la intensidad del canal especular en función del ángulo incidente para una partícula con energía incidente fija ($E = 20$ meV). En este cálculo "unidimensional" se incluyeron 6 canales ($n = 2, 1, 0, -1, -2, -3$) y se usó el mismo potencial considerado en el capítulo 2 y 3 (ver (2.2), (3.1) y Figuras 1 y 3), con una rugosidad $\beta = 0.14$. En la Figura 10 se observan 3 resonancias que, según la explicación convencional, deberían ocurrir cuando la energía cinética en la dirección \hat{z} de un canal cerrado coincide con la energía de un estado ligado del potencial $V_0(z)$ [13, 16, 17], es decir, si para un canal n se cumple la condición

$$k_n^2 = k^2 - \left(k_x + \frac{2\pi n}{a}\right)^2 = \frac{2M}{\hbar^2} \varepsilon_i \quad (1)$$

donde $\varepsilon_i < 0$ ($i = 1, 2, \dots, s$) es la energía de un estado ligado del potencial $V_0(z)$. El potencial $V_0(z)$ que se está usando para los cálculos asociados a la Figura 10 posee 3 estados ligados (ver Apéndice B) y las flechas sólidas en

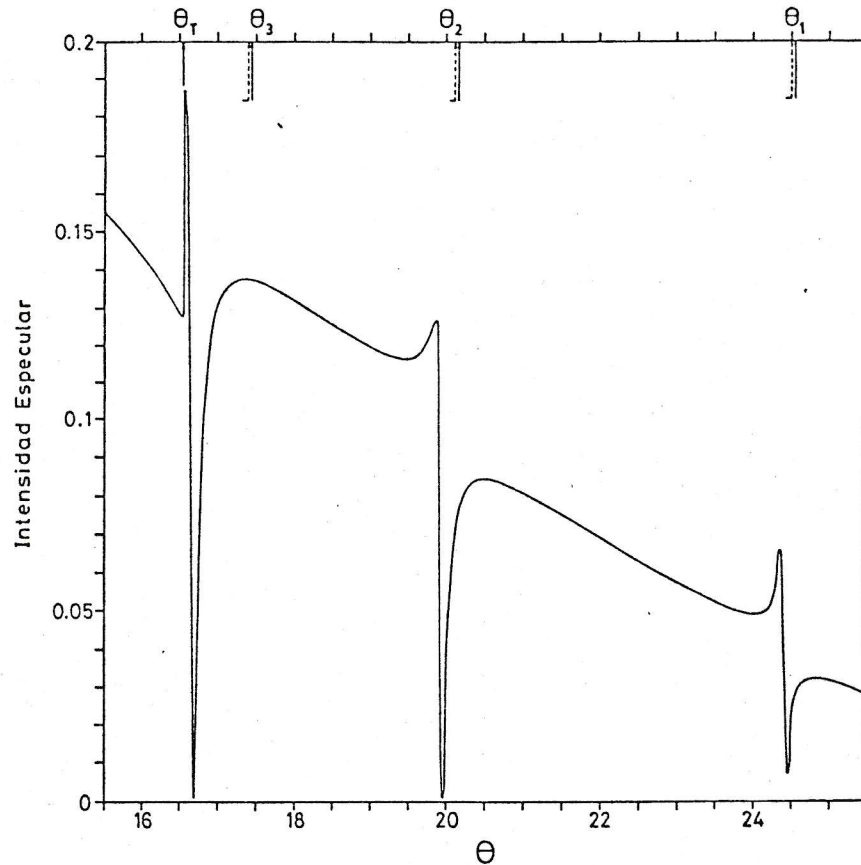


Figura 10. Resonancias observadas en la intensidad especular para el scattering He-LiF (unidimensional). La energía incidente es de 20 meV, y en el cálculo se incluyeron 6 canales (-3, -2, -1, 0, 1, 2), donde el canal $n=2$ es cerrado. En la parte superior, con flechas llenas se indican la posición predicha para las resonancias de acuerdo a la ecuación (4.1) y con flechas cortadas el lugar de estas resonancias de acuerdo con el proceso de rediagonalización descrito en la sección 4.2.

θ_i ($i = 1, 2, 3$) indican los ángulos de incidencia para los cuales se cumple la condición (1) para el canal $n = 2$.

Este canal es un canal cerrado para ángulos de incidencia mayores que $\theta_T = 16.55^\circ$ (ver Figura 10).

Para el ángulo θ_T ocurre un cambio brusco en la intensidad llamada umbral ("threshold"). Sin embargo, es importante hacer notar que el umbral y la primera resonancia son dos fenómenos diferentes. Esto se aprecia con mayor claridad en las Figuras 11 y 12, que muestran el efecto de la resonancia cerca del continuo ($i = 3$), para todos los canales abiertos.

En la Figura 10 se observan corrimientos de las resonancias respecto de los ángulos θ_i dados por la ecuación (1). Estos corrimientos son pequeños para las resonancias correspondientes a los estados ligados \mathcal{E}_1 y \mathcal{E}_2 . Mucho más grande es el corrimiento de la resonancia originada por el estado ligado \mathcal{E}_3 , el cual se debe a la cercanía de este estado ligado con el continuo.

En diversos trabajos numéricos [16, 17, 20-22] se pueden observar estos corrimientos. Sin embargo, el origen de estos corrimientos no es entendido cabalmente. En algunos casos las resonancias predichas no aparecen y por otra parte aparecen resonancias que no pueden ser explicadas por la ecuación (1). Situaciones especiales se producen también

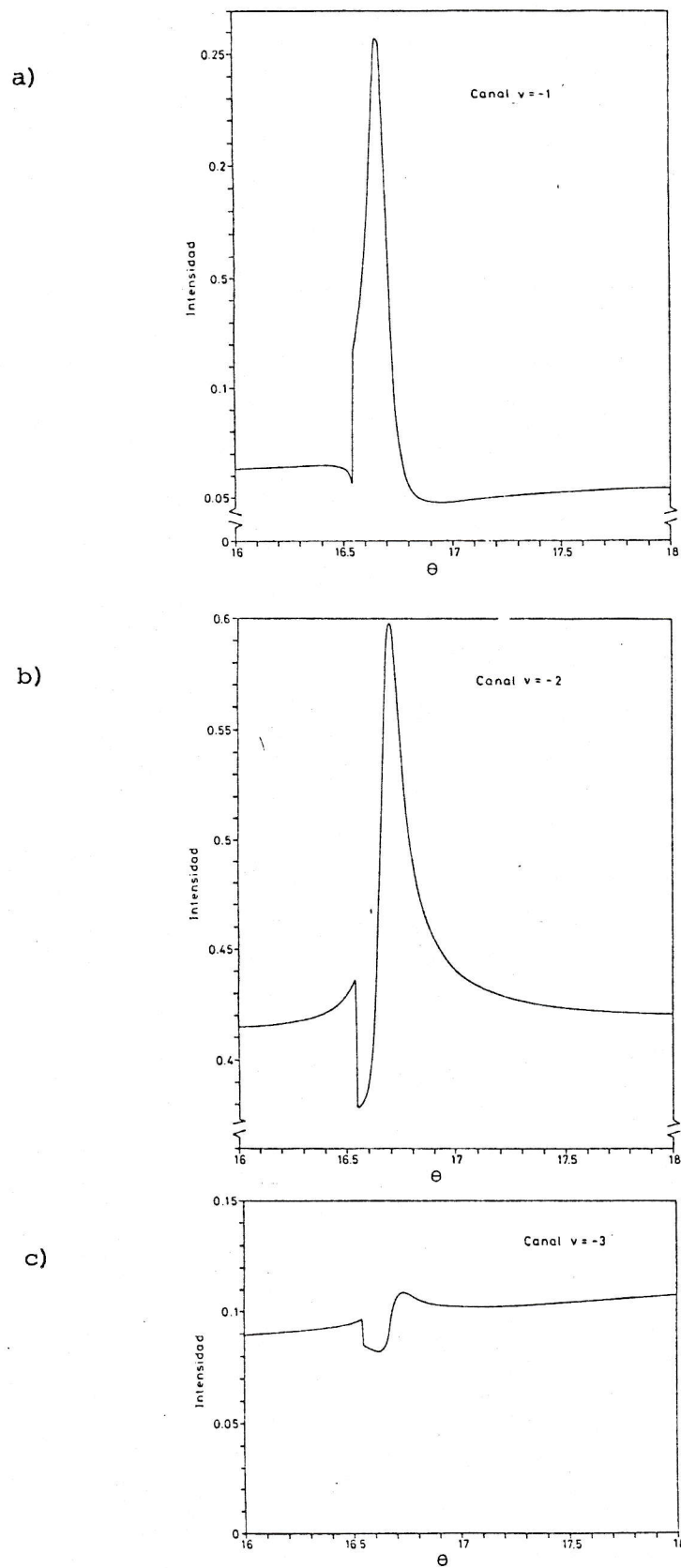


Figura 11. Detalle del mismo cálculo considerado en la figura anterior mostrando el umbral y la resonancia del canal $v=2$ con el estado ligado E_2 observada en los canales a) $v=-1$, b) $v=-2$, c) $v=-3$.

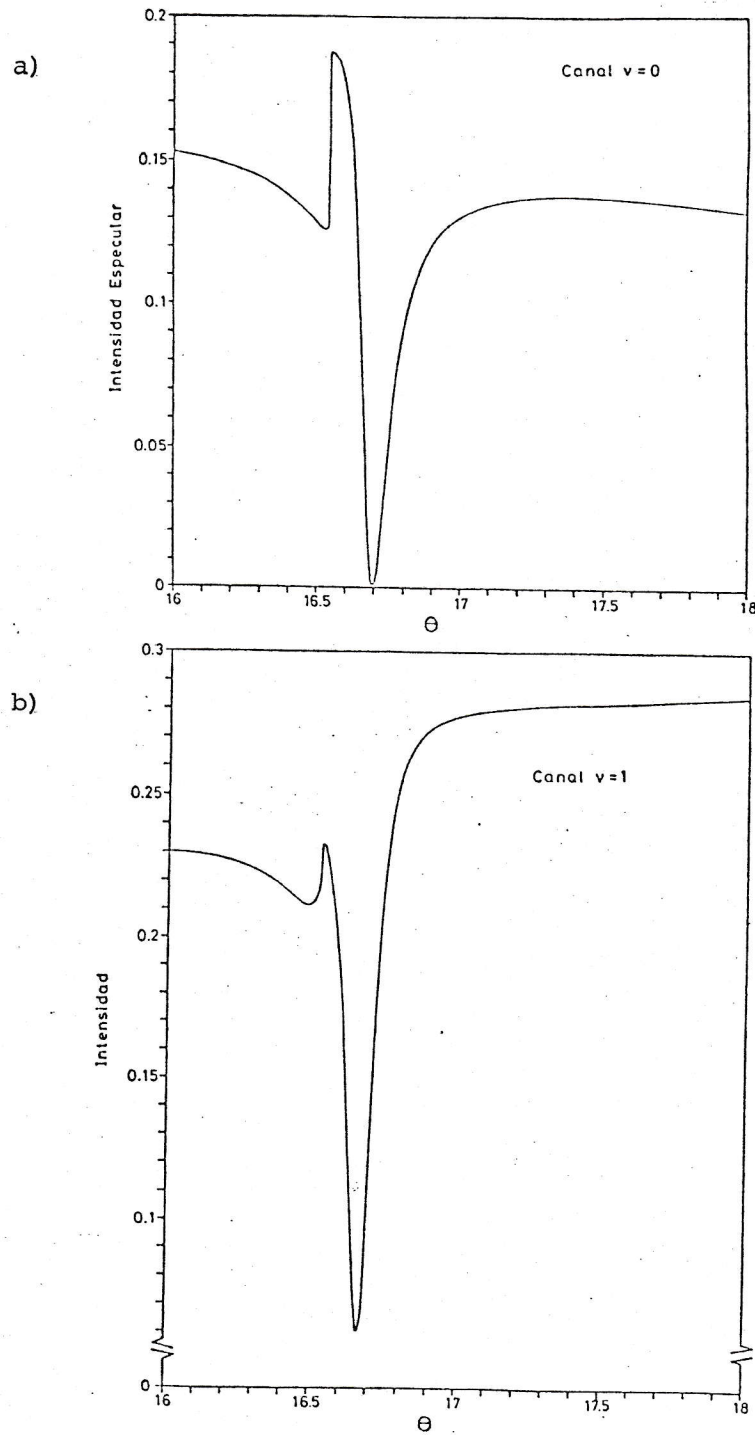


Figura 12. Lo mismo que en la Figura 11, pero observando el umbral y la resonancia en los canales a) $v=0$ y b) $v=1$; nótese el carácter complementario de esta figura y las mostradas en la Figura 11, se tiene resonancias de máximo para $v=-1, -2,$ y -3 y mínimos para $v= 0$ y $v= 1$.

cuando la relación (1) se cumple simultáneamente para dos canales cerrados n y n' , es decir, si la energía cinética en la dirección \hat{z} asociada a estos dos canales coincide con las energías \mathcal{E}_i y \mathcal{E}_i' de dos estados ligados del potencial $V_0(z)$ (pudiéndose tener $\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_i'$). Cálculos numéricos para estos casos [20-21] muestran ambas resonancias separadas.

4.2 Rediagonalización del espectro ligado

Consideremos el hamiltoniano para el sistema "unidimensional" y escribámoslo en la forma

$$H = H_0 + V_1(x, z) \quad (2)$$

con

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V_0(z) \quad (3)$$

y

$$V_1(x, z) = V_1(z) \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (4)$$

donde los potenciales $V_0(z)$ y $V_1(z)$ fueron definidos por las ecuaciones (2.3) y (2.4).

Sea \mathcal{H} el espacio de Hilbert generado por todas las soluciones físicas asociadas al hamiltoniano H . Separemos

este espacio en una suma directa de los espacios de soluciones ligadas y libres:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2. \quad (5)$$

El espacio \mathcal{H}_1 está definido a través de la base

$$\mathcal{H}_1: \left\{ \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{a}} \phi_i(z) \right\} = \left\{ \langle x, z | k_x, i \rangle \right\}_{\substack{i=1,2,\dots,5 \\ -\infty \leq k_x \leq \infty}} \quad (6)$$

donde $\phi_i(z)$ son las soluciones estacionarias de energía negativa de la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0(z) \right] \phi_i(z) = \varepsilon_i \phi_i(z). \quad (7)$$

Estas soluciones no pueden ser directamente observadas en el proceso de detección, pues cumplen con

$$\phi_i(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} 0. \quad (8)$$

El espacio \mathcal{H}_2 está definido a través de la base

$$\mathcal{H}_2: \left\{ \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{a}} f_{k_z}(z) \right\} = \left\{ \langle x, z | k_x, k_z \rangle \right\}_{\substack{-\infty \leq k_x \leq +\infty \\ 0 \leq k_z \leq +\infty}} \quad (9)$$

Las funciones $f_{k_z}(z)$ cumplen con

(*) k_z es un índice cuasi-continuo en el sentido que $k_z = \frac{2\pi l}{L}$ con $l \in \mathbb{N}$ y $L \rightarrow \infty$.

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{k_z}^+(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} e^{-ik_z z} + e^{i(\delta(k_z) + k_z z)} \\ f_{k_z}^-(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} 0 \end{array} \right. \quad (10a)$$

donde $\delta(k_z)$ son los corrimientos de fase introducidos por el potencial $V_0(z)$.

Operando con el hamiltoniano \check{H}_0 sobre la base del espacio \mathcal{H}_1 (Ec (6)), es decir,

$$\check{H}_0 |k_x, i\rangle = \varepsilon(k_x, i) |k_x, i\rangle \quad (11)$$

obtenemos la relación de dispersión

$$\varepsilon(k_x, i) = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2M} \quad (12)$$

La Figura 13 muestra esta relación de dispersión para el potencial $V_0(z)$ considerado en el presente trabajo (ver Tabla 1 para los parámetros y el Apéndice B para el cálculo de las energías ε_i).

Es usual en la física del estado sólido representar esta relación de dispersión reducida a la primera zona de Brillouin, (ver Figura 14).

Dada la periodicidad del potencial $V_1(x, z)$ en la dirección \hat{x} , éste solo produce transiciones entre estados con distinto momento k_x mientras se mantiene inalterado el

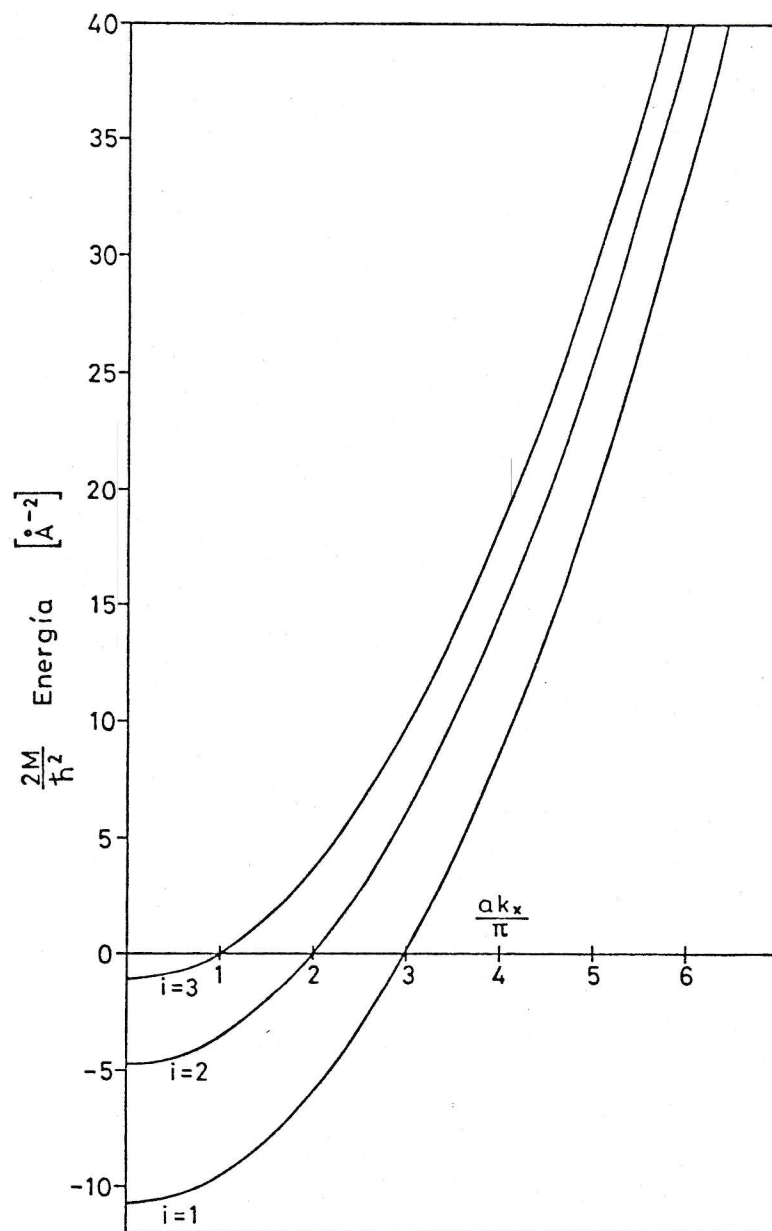


Figura 13. Relación de dispersión (4.12)

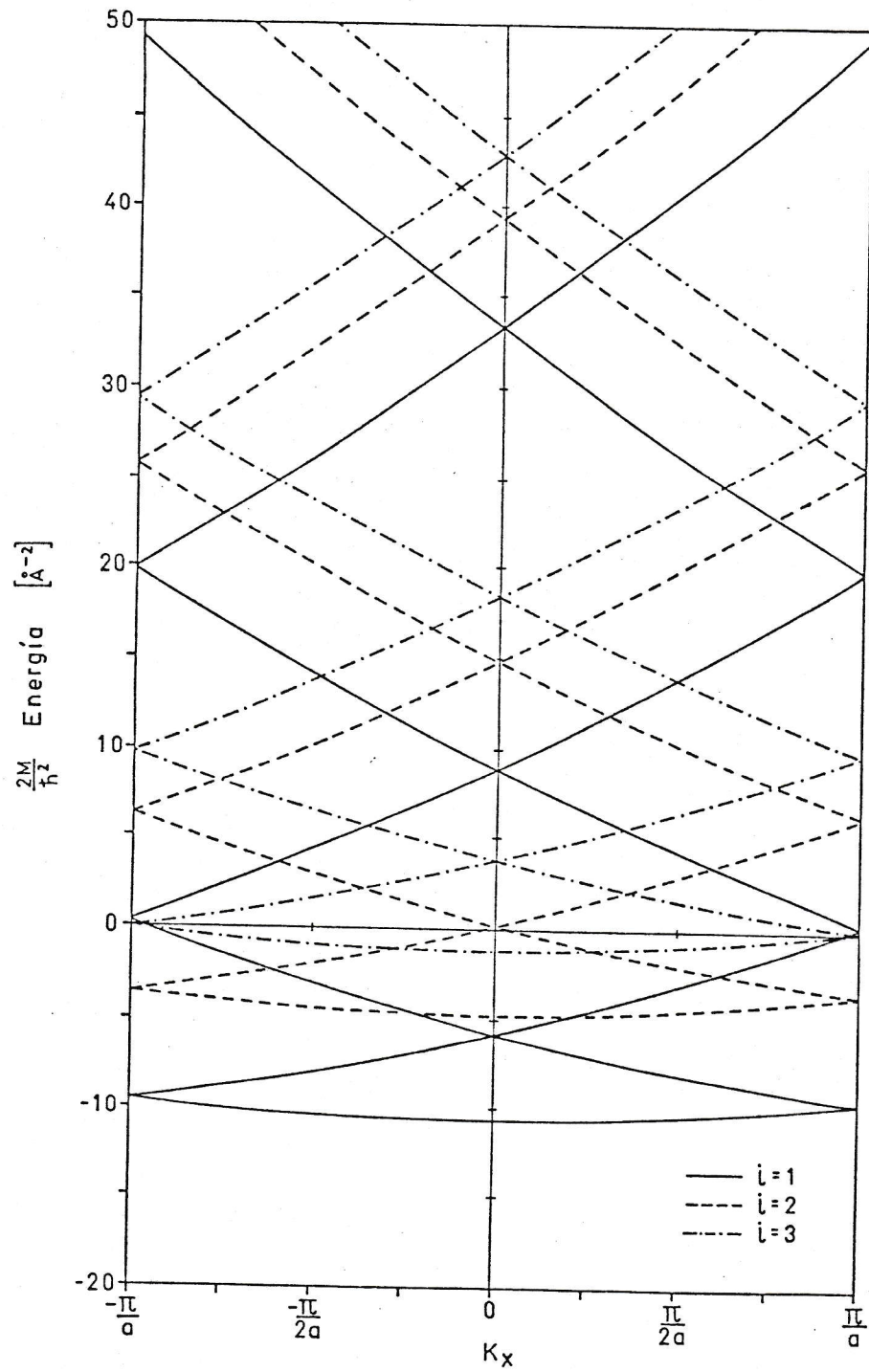


Figura 14. Relación de dispersión (4.16), o equivalentemente la Figura 13, reducida a la primera zona de Brillouin.

pseudomomento \tilde{k}_x .

El momento k_x y el pseudomomento \tilde{k}_x vienen relacionados por

$$k_x = \tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l \quad \text{con } l \in \mathbb{Z} \quad (13)$$

donde \tilde{k}_x se elige en el intervalo $-\frac{\pi}{a} < \tilde{k}_x < \frac{\pi}{a}$ (1era zona de Brillouin).

Debido a que el pseudomomento es una constante de movimiento para el presente problema de Scattering, trabajaremos de aquí en adelante en un subespacio \mathcal{H}' de \mathcal{H} en que el pseudomomento es fijo. De esta manera los subespacios \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 se reducen a los subespacios \mathcal{H}'_1 y \mathcal{H}'_2 para los cuales una base viene dada por

$$\mathcal{H}'_1: \left\{ \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l)x} \phi_i(z) \right\} = \left\{ \langle x, z | l, i \rangle \right\}_{\substack{i=1,2,\dots,s \\ l \in \mathbb{Z}}} \quad (14)$$

$$\mathcal{H}'_2: \left\{ \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l)x} f_{k_2}(z) \right\} = \left\{ \langle x, z | l, k_2 \rangle \right\}_{\substack{0 \leq k_2 < \infty \\ l \in \mathbb{Z}}} \quad (15)$$

Con estas bases la relación de dispersión dada por la ecuación (12) se reescribe como

$$E(l, i) = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l \right)^2 + \varepsilon_i \quad (16)$$

La energía E y la dirección (k_x, k_z) de la partícula incidente permiten fijar el pseudomomento \tilde{k}_x :

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2M} (k_x^2 + k_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} m \right)^2 + k_z^2 \right] \quad \text{para cierto } m \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (17)$$

Si la energía de la partícula incidente E coincide con la energía de un autoestado de H_0 que pertenece a \mathcal{H}_1' , obtendremos la condición (1) para las resonancias. Usando las ecuaciones (16) y (17), la condición $E = \mathcal{E}(l, i)$ para las resonancias queda

$$\frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} m \right)^2 + k_z^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l \right)^2 + \mathcal{E}_i \quad (18)$$

De (18) se obtiene que $n = (m-l)$ es la distancia, en número de vectores de red recíproca $\frac{2\pi}{a}$, a que se encuentra un canal cerrado que genera resonancias, respecto al canal especular.

Escribamos el Hamiltoniano \check{H}_0 de la forma

$$\check{H}_0 = \check{H}_{01} + \check{H}_{02} \quad (19)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1' &\xrightarrow{\check{H}_{01}} \mathcal{H}_1' \\ \mathcal{H}_2' &\xrightarrow{\check{H}_{02}} \mathcal{H}_2' \end{aligned} \quad (20)$$

Los hamiltonianos \check{H}_{01} y \check{H}_{02} vienen dados por

$$\check{H}_{01} = \sum_{l,i} \left(\frac{\hbar^2}{2M} \left(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l \right)^2 + \epsilon_i \right) |l,i\rangle \langle l,i| \quad (21)$$

$$\check{H}_{02} = \sum_{l,k_z} \frac{\hbar^2}{2M} \left(\left(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a} l \right)^2 + k_z^2 \right) |l,k_z\rangle \langle l,k_z| \quad (22)$$

de la misma forma el potencial $V_1(x,z)$ se escribe:

$$\check{V}_1 = \check{V}_{11} + \check{V}_{22} + \check{V}_{12} + \check{V}_{21} \quad (23)$$

donde

$$\check{V}_{11} = \sum_{ll'ii'} |l,i\rangle \langle l,i| \check{V}_1 |l',i'\rangle \langle l',i'| \quad (24)$$

$$\check{V}_{22} = \sum_{ll'k_z k_z'} |l,k_z\rangle \langle l,k_z| \check{V}_1 |l',k_z'\rangle \langle l',k_z'| \quad (25)$$

$$\check{V}_{12} = \sum_{lil'k_z'} |l,i\rangle \langle l,i| \check{V}_1 |l',k_z'\rangle \langle l',k_z'| \quad (26)$$

$$\check{V}_{21} = \check{V}_{12}^* \quad (27)$$

Con estas definiciones el hamiltoniano total del sistema

(ec. 2) se puede escribir de la forma

$$\check{H} = \check{H}_{11} + \check{H}_{22} + \check{V}_{12} + \check{V}_{12}^* \quad (28)$$

donde los operadores \check{H}_{11} y \check{H}_{22} vienen dados por

$$\check{H}_{11} = \check{H}_{01} + \check{V}_{11} \quad (29)$$

$$\check{H}_{22} = \check{H}_{02} + \check{V}_{22} \quad (30)$$

Si asumimos $\beta = 0$ entonces $V_{12} = V_{21} = 0$ y las soluciones de scattering asociadas a \mathcal{H}_2 no se mezclarán con los estados ligados a la superficie (asociados a \mathcal{H}_1). En este caso, no hay razones para esperar variaciones bruscas de la función de onda de scattering respecto a la energía. Si ahora consideramos un β pequeño pero no nulo, entonces V_{12} en general llevará a una pequeña corrección de los estados de scattering, los cuales se hibridizarán ligeramente con los estados originalmente ligados que se encuentran en \mathcal{H}_1 ; tal corrección se puede analizar en principio mediante teoría de perturbaciones sobre $V_{12} + V_{21}$; para ellos requerimos diagonalizar previamente H_{11} y H_{22} . Sin embargo, si la energía del estado de scattering en consideración es muy cercana a un autoestado de H_{11} (recuérdese que tales autoestados forman un discreto pues estamos trabajando con pseudo-momento fijo), entonces la función de scattering se hibridizará fuertemente con el estado ligado de energía similar. Esta hibridización no sólo alterará la función de scattering cerca de la superficie (que es la zona donde los estados son no nulos) sino que también en la zona de scattering

$Z \rightarrow \infty$ dada la condición de continuidad. Es importante notar que este efecto sólo es apreciable en una zona de energía muy estrecha entorno a la energía del estado ligado (pues asumimos β pequeño), de modo que la función de scattering (originalmente de variación suave) ahora variará bruscamente en torno a energías cercanas al autoestado de H_{11} en consideración; esto justamente define la resonancia.

En el presente trabajo no mostraremos en detalle como ocurre la hibridización recién mencionada, pues un desarrollo en este sentido sobrepasa los objetivos de esta tesis que solo pretende mostrar parte de un planteamiento general propuesto por J. Rössler [23]; solo nos limitaremos a evaluar los autoestados de H_{11} , los cuales son claves en el proceso de resonancia como indicamos recién.

Los elementos de matriz $\langle l, i | \hat{V}_1 | l', i' \rangle$ se pueden obtener en forma analítica (ver Apéndice B) lo que facilita la rediagonalización que se realiza numéricamente. Esta diagonalización genera una nueva relación de dispersión que para $\beta = 0.14$ se muestra en la Figura 15. En esta figura notamos que donde anteriormente existían cruces de niveles, o equivalentemente dos resonancias simultáneas, ahora se han separado (gaps), siendo esta separación cada vez menor a medida que aumenta la energía.

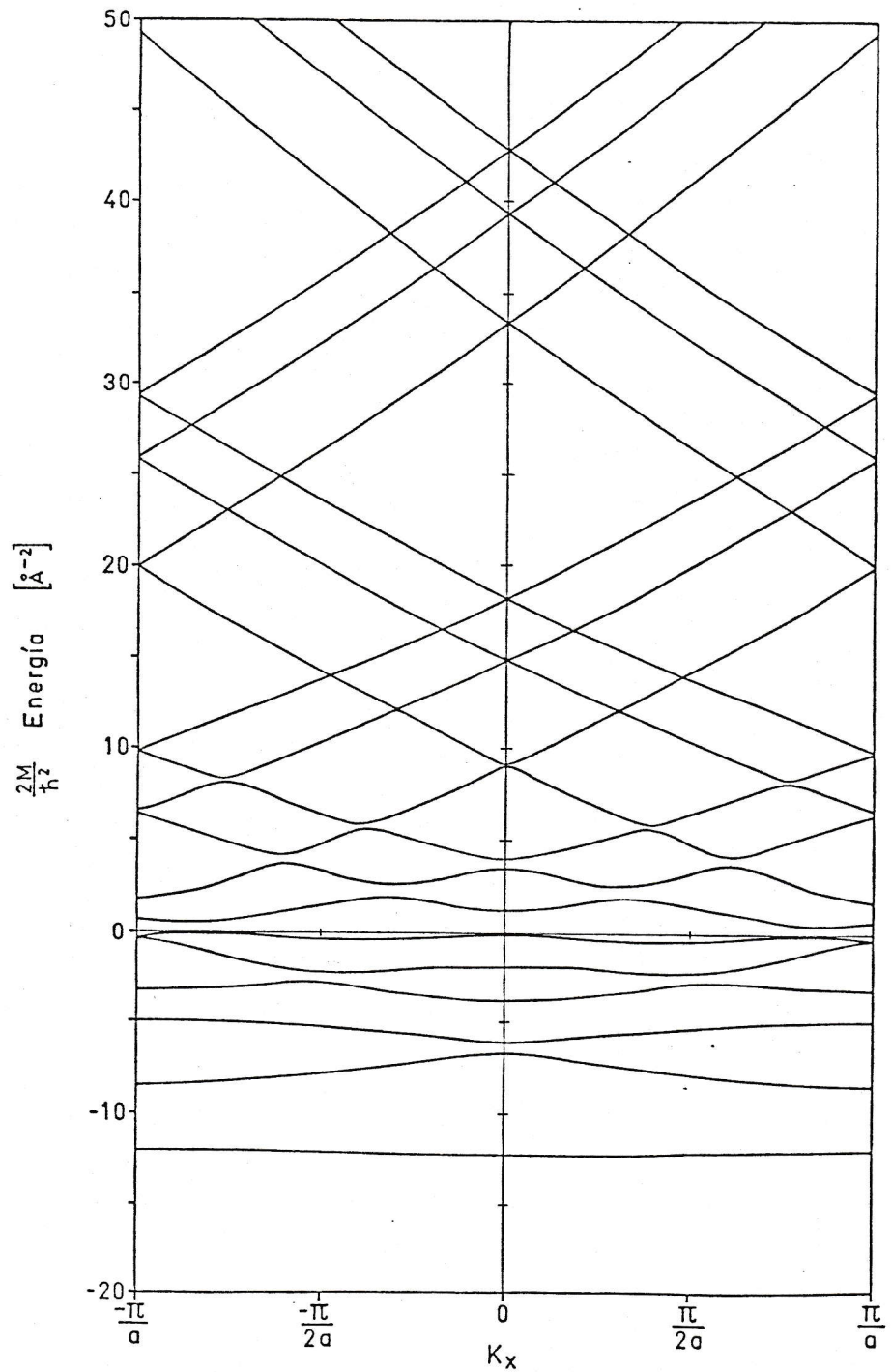


Figura 15. Relación de dispersión producto de la diagonalización de H_{11} en el subespacio \mathcal{H}_1 para $\beta=0.14$.

En la Figura 10 se indican con flechas cortadas los lugares donde son predichas las resonancias después de realizar el proceso de rediagonalización. Aquí los corrimientos son pequeños debido a que para esta energía ($E = 20 \text{ meV}$ o equivalentemente $\frac{2M}{\hbar^2} E = 38.2 \text{ \AA}^{-2}$) el efecto de la rediagonalización es prácticamente despreciable. Notemos que en el presente desarrollo no hemos considerado la hibridización de las soluciones ligadas con el continuo que supuestamente es el origen de la mayor parte del corrimiento de la resonancia en Θ_3 ; esto se explica por encontrarse muy cerca del umbral [23].

Es interesante analizar las brechas (gaps) que ocurren en los bordes de zona ($k_x = \pm \pi/a$), pues corresponden a 2 resonancias generadas por 2 canales cerrados con un único estado ligado ϵ_i .

Con este objeto, se ha realizado un cálculo numérico de intensidades de scattering para el caso en que la partícula incide con pseudomomento en la dirección x cercano al borde de zona ($k_x \approx \pi/a$).

La Figura 16, es una ampliación de la Figura 15 en el mismo rango de energía en que se realizan estos cálculos, donde se utilizan sólo 4 canales (-2, -1, 0, 1) debido a la baja energía de la partícula incidente.

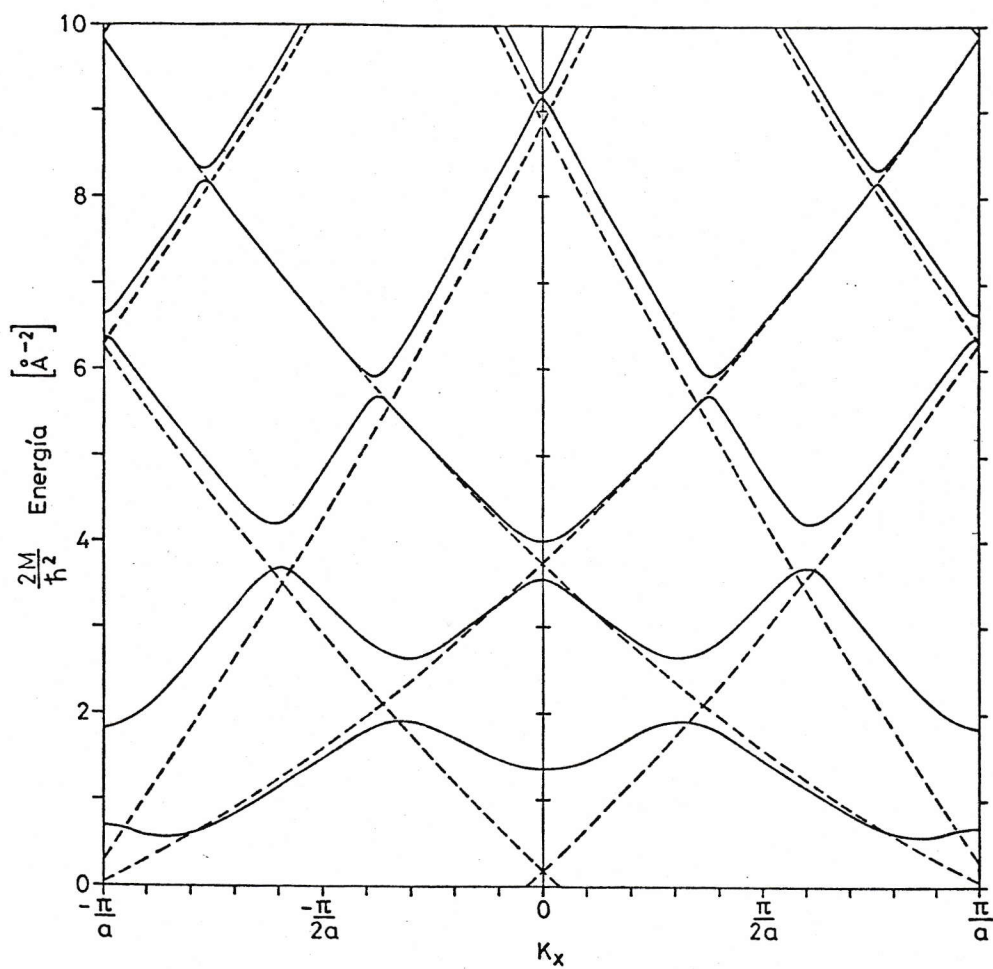


Figura 16. Ampliación de la Figura 15. Con línea llena los resultados de la diagonalización de H_{11} en \mathcal{H}' para $\beta=0.14$, con línea cortada la relación de dispersión (4.16).

Los resultados de estos cálculos se muestran en las Figuras 17, 18 y 19. Estas figuras muestran en forma espectacular la brecha (gap). Según el antiguo esquema (antes de la rediagonalización) se debería observar sólo una resonancia para $k_x = \frac{\pi}{a}$, mientras según el nuevo esquema (o sea después de la rediagonalización) deben aparecer 2 resonancias, que se separan a medida que disminuye k_x del valor π/a .

En la Figura 20, que es una ampliación de la Figura 17, se ha indicado con una línea cortada la energía incidente para la cual se cumple simultáneamente la condición de resonancia (en el antiguo esquema, ec. (1)) para los canales $n = -2$ y $n = +1$ con el estado ligado \mathcal{E}_2 . Con flechas continuas se indica el lugar predicho para las resonancias después de rediagonalizar. A modo de conclusión, se puede decir que el modelo aquí propuesto explica en gran parte lo que sucede cuando dos resonancias ocurren simultáneamente. La separación teórica predicha prácticamente coincide con lo observado en los cálculos numéricos.

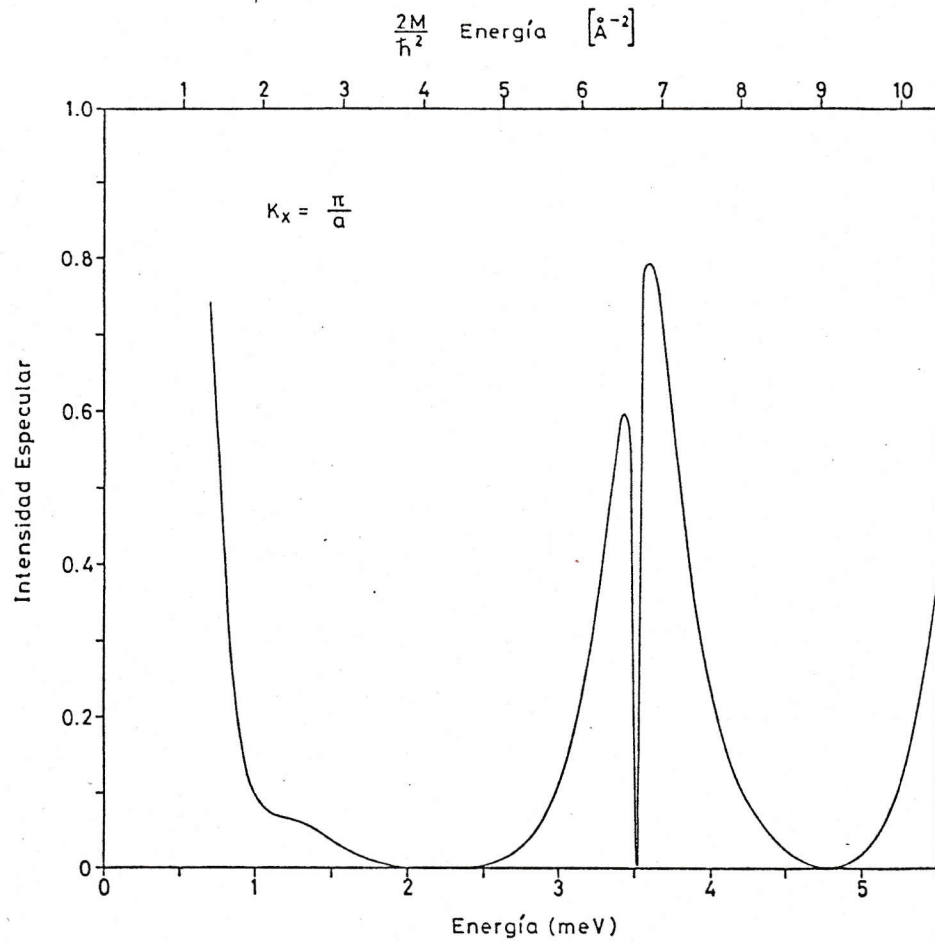


Figura 17. Intensidad especular para el scattering He-LiF "unidimensional" en función de la energía incidente. La componente \hat{x} del momento incidente es fija $k_x = \pi/a$. El cálculo fue realizado con 4 canales ($n=-2, -1, 0, 1$), donde los canales (cerrados) $n=-2$ y $n=1$ coinciden en el valor de $\epsilon_i = 2$ y a su vez con el estado ligado $\epsilon_i = 2$.

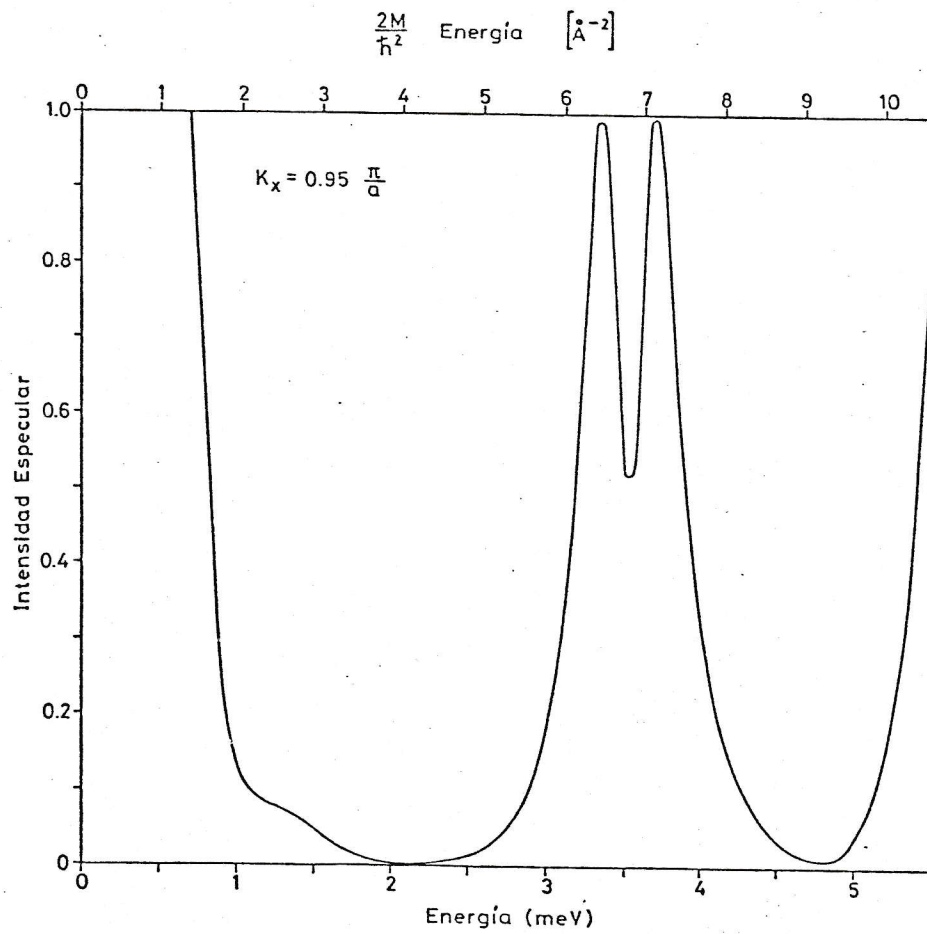


Figura 18. Igual que la figura anterior pero con $k_x = 0.95 \pi/a$.

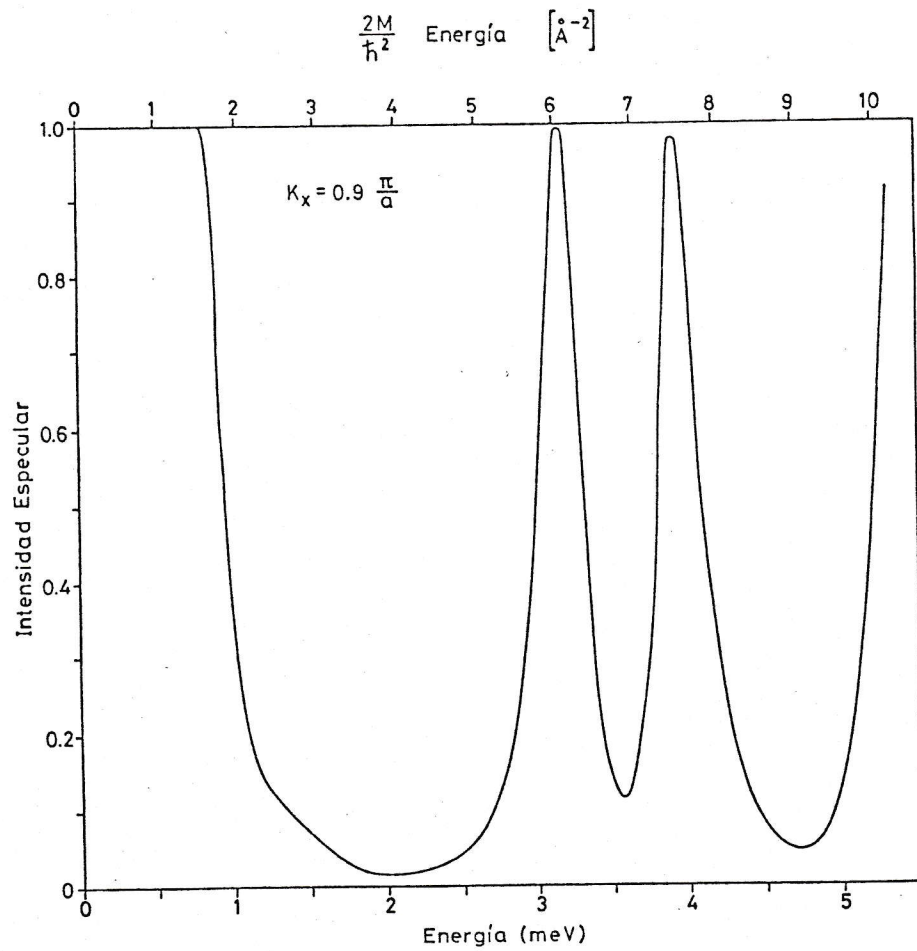


Figura 19. Igual que la figura anterior pero con $k_x = 0.9 \pi/a$.

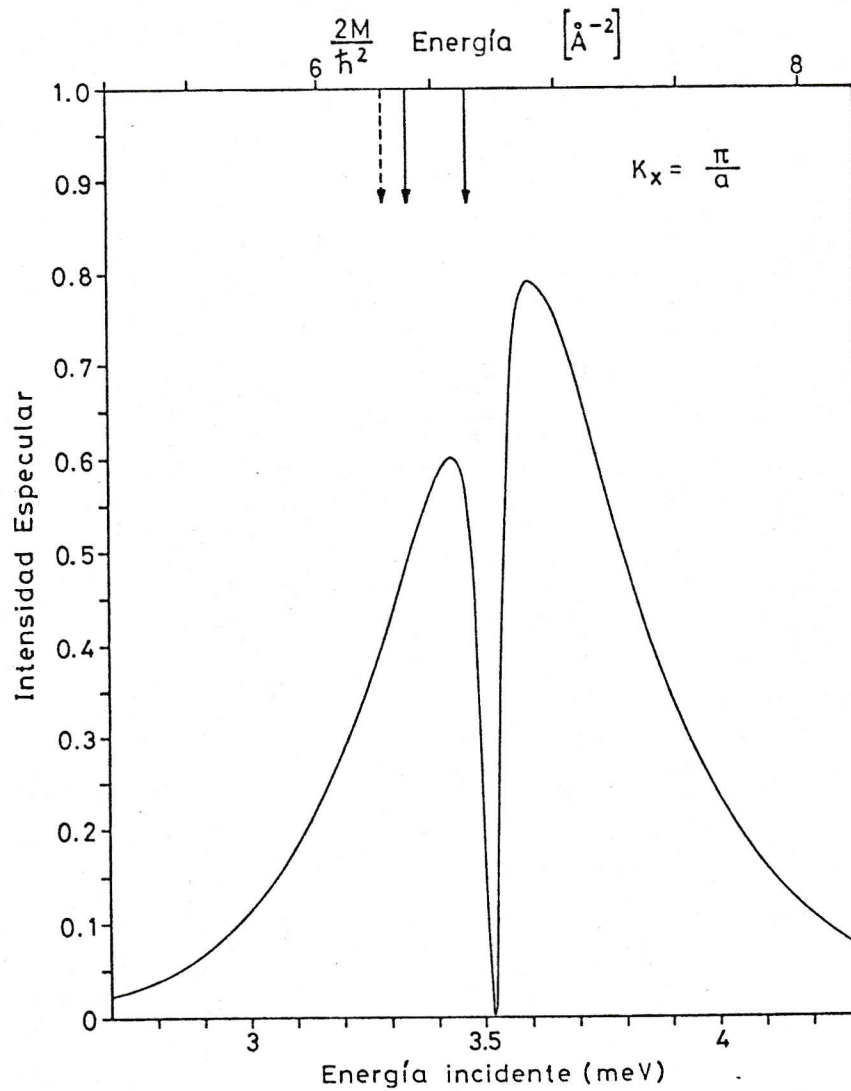


Figura 20. Intensidad especular en función de la energía incidente (ampliación de la Figura 17). Con línea cortada se indica la predicción para la resonancia simultánea de los canales $n=-2, 1$ con el estado ligado ε_2 de acuerdo con la ecuación (4.1). Las líneas llenas muestran la predicción de la posición de las resonancias después de la rediagonalización.

5. COMPARACION DE RESULTADOS

5.1 *Comparación con cálculos numéricos de otros autores*

En la literatura se encuentran diversos trabajos teóricos sobre scattering de átomos por superficies. Para realizar una comparación con resultados obtenidos por Wolken [16] y Chow y Thompson [17], se estudiará el comportamiento de la intensidad especular como función de la energía incidente para el scattering de He-LiF en el plano (001) y en el rango de energías incidentes de 1 a 14 meV con ángulos de incidencia $\theta = 40^\circ$ y $\phi = 0^\circ$. Aquí ϕ es el ángulo azimutal respecto a la dirección principal de la superficie y θ el ángulo que forma el haz incidente con el eje z. Para la realización de estos cálculos usamos el mismo potencial propuesto por estos autores (ver ecuación 2.2 y Tabla 1) y un conjunto de 5 canales indicados por los vectores de red recíproca $(0,0)$, $(\pm 1,0)$, $(0, \pm 1)$.

Las Figuras (21b) y (21a) muestran la intensidad especular en función de la energía incidente obtenidos por G. Wolken y el programa de computación presentado en el Apéndice C de este trabajo, respectivamente.

Al comparar ambas figuras se aprecian algunas pequeñas diferencias: (i) Un comportamiento levemente distinto en la vecindad del umbral T_1 ; (ii) Un leve corrimiento de la

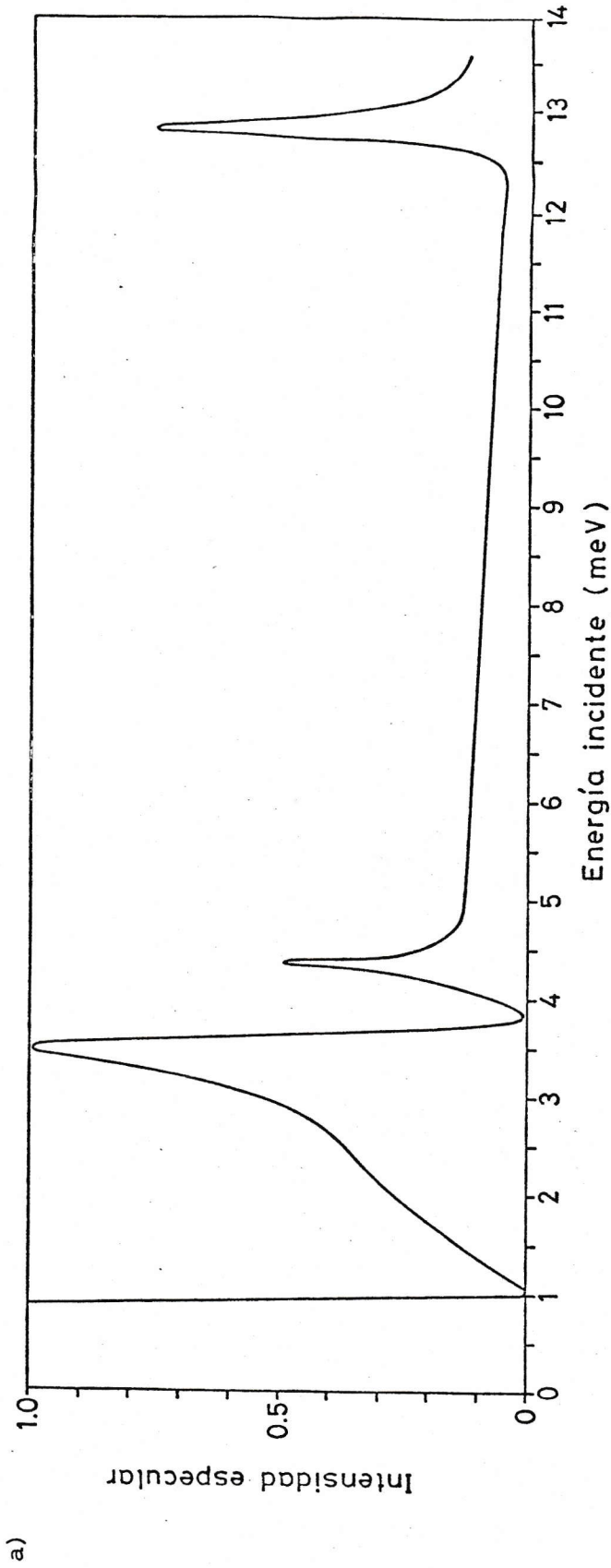
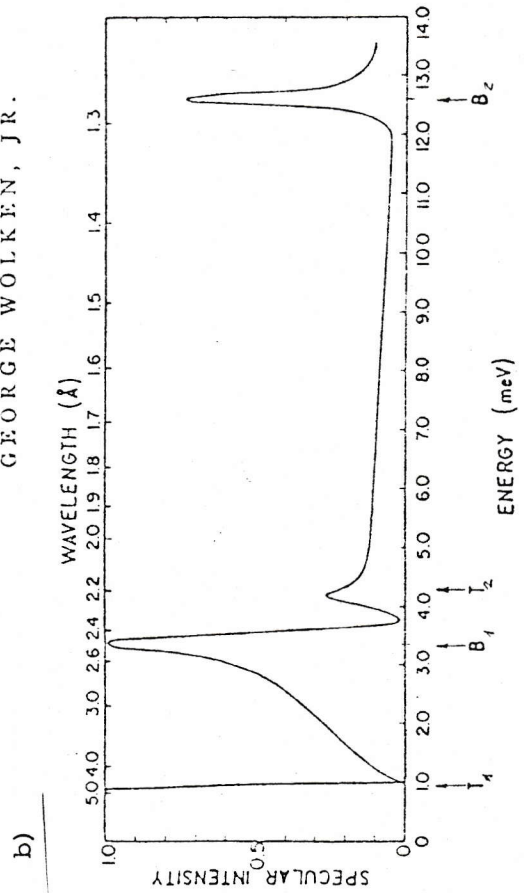


Figura 21. Intensidad especular en función de la energía incidente para el scattering He-LiF. Corrugación $\beta=0.1$, $\theta=40^\circ$, $\phi=0^\circ$. Los cálculos fueron realizados con los 5 canales $(\pm 1,0)$, $(0,0)$, $(0,\pm 1)$. (a) Resultados obtenidos con nuestro programa. (b) Resultados obtenidos por Wolken.

GEORGE WOLKEN, JR.



resonancia B_1 y el umbral T_2 ; (iii) Una intensidad y forma distinta en la vecindad del umbral T_2 .

Las Figuras (22a) y (22b) corresponden a una ampliación del caso anterior. Los cálculos de la Figura (22b) fueron obtenidos por Chow y Thompson [17] y los de la Figura (22a) por el programa descrito en el Apéndice C.

Entre las Figuras (22a) y (22b) no se aprecia ninguna diferencia; lo que parecería indicar que las diferencias observadas en la Figura (21) se deberían a problemas numéricos del programa computacional de Wolken.

Las comparaciones anteriores nos dan confianza de que el programa computacional desarrollado en el presente trabajo (ver Apéndice C) produce buenos resultados.

5.2 Comparación de otros Métodos de Solución

Existe una gran variedad de formas para abordar el problema del scattering elástico de átomos sobre superficies cristalinas.

i) *Métodos semiclásicos*

Estos métodos fueron desarrollados por W.H. Miller [24, 25] y R.A. Marcus [26, 27] y se basan en generalizaciones del método WKB a problemas multidimensionales. En estos métodos, la amplitud de los distintos picos de difracción se obtiene

encontrando las trayectorias clásicas de movimiento de átomos incidentes y manteniendo simultáneamente la información de la fase (es decir, contando el número de longitudes de onda de Broglie a lo largo de la trayectoria clásica) haciendo luego interferir todas las trayectorias que contribuyen a un mismo pico de difracción. El gran atractivo de estos métodos es que dan un conocimiento acaso más intuitivo de lo que está ocurriendo, en relación al método de canales acoplados.

J.D. Doll [28, 29] y Masel et al. [30] han aplicado estos métodos al scattering de átomos de He sobre superficies de LiF. La concordancia con los resultados "exactos" es solo semicuantitativa. La aplicación de estos métodos al presente problema no ha sido estudiado en forma exhaustiva. En la actualidad se están investigando [31] las condiciones bajo las cuales estos métodos serían válidos para así tener una mejor visión de las limitaciones de los mismos.

Masel et al. [32] también aplicaron la aproximación semiclásica al caso en que el potencial es aproximado por una pared dura sinusoidal. La simplificación que esto introduce permite realizar los cálculos para éste y otros métodos en forma analítica.

ii) *El método CCGM*

El método CCGM ya mencionado anteriormente, ha sido desarrollado por Goodman et al. [33-36] es básicamente una aproximación de Born de primer orden.

iii) *El método Eiconal*

El método Eiconal (también conocido bajo el nombre de aproximación de Kirchoff), es una aproximación que originalmente fue desarrollada y aplicada a problemas de óptica y acústica. Posteriormente estos métodos también se han utilizado en el análisis de colisiones de partículas y núcleos a altas energías. En este método se aproxima la trayectoria de la partícula por líneas rectas, lo cual con frecuencia da expresiones analíticas para la amplitud de scattering. El método Eiconal ha sido aplicado al scattering de átomos sobre superficies cristalinas por Levi et al [37] y Berry [38], sin embargo, hay que hacer notar que este método está limitado a ángulos de incidencia cerca de la normal y energías no demasiado chicas (es decir, la longitud de onda de la partícula incidente debe ser mucho menor que el parámetro de red).

Probablemente, tanto el método Eiconal como el método semiclásico (al menos en su forma primitiva), son incapaces de predecir el fenómeno de resonancias descritos en el

Capítulo 4, lo que limitaría considerablemente el interés por estos métodos.

iv) *Método iterativo usando funciones de Green*

Este método, basado en un esquema de integración iterativo usando funciones de Green, fue desarrollado para el presente problema por H. Chow [39]. El método, que es esencialmente exacto, da resultados que están en acuerdo con el método que será descrito en v). Sin embargo, este método converge muy lentamente cuando se está sobre una resonancia.

v) *Método de canales acoplados*

Para un sinnúmero de problemas de la física, éstos pueden reducirse a resolver un conjunto (generalmente infinito) de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden. Para resolver estas ecuaciones diferenciales acopladas, generalmente se requiere de mucho tiempo de computación, y por lo tanto, estos métodos son sólo prácticos si el número de canales que intervienen en el proceso pueden ser reducidos a un número finito no demasiado grande (el tiempo de computación es aproximadamente proporcional al cuadrado del número de canales incluidos en el cálculo).

Para el problema de scattering considerado en esta tesis, el primero en realizar cálculos de canales acoplados

TABLA 3

Comparación del tiempo de ejecución de distintos programas numéricos de canales acoplados

Referencia	Computador	Número de Canales	Tiempo de ejecución
Wolken [16]	UNIVAC 1108	5	10 seg
		29	480 seg
Chow y Thompson [17]	UNIVAC 1108	9	20 seg
		15	50 seg
El presente trabajo	IBM 3237	5	4 seg
		25	44 seg

fue Wolken [16] seguido luego por Chow y Thompson [17] . Estos programas numéricos, incluyendo el presentado en esta tesis, son probablemente muy similares (generalmente de los trabajos publicados no se desprenden los detalles). Es probable que nuestro trabajo presente una novedad numérica con respecto al de estos otros autores en cuanto al ensamble (de las soluciones de canales acoplados con las soluciones para $z \rightarrow +\infty$) no se realiza en z_a (es decir, en un lugar donde el potencial es ya prácticamente cero), sino que aprovechando el hecho de que las ecuaciones (2.18) se desacoplan mucho antes, el ensamble se realiza en z_f . Este hecho permite un ahorro sustancial en tiempo de ejecución y aminora el mismo tiempo un problema numérico que surge de los canales cerrados (este problema consiste en que para evaluar la matriz $a_{\mu\nu}$ y $b_{\mu\nu}$, en la función de onda que es exponencialmente creciente para $z \rightarrow +\infty$ para los canales cerrados, hay que poder distinguir una parte que es exponencialmente decreciente; por consiguiente, esta dificultad numérica es cada vez más crítica a medida que aumenta z).

La Tabla 3 muestra en forma comparativa el tiempo de ejecución de los distintos programas existentes.

El método de canales acoplados es más eficiente que el método iterativo usando funciones de Green cuando se está sobre una resonancia; en la mayoría de los demás casos, los

dos métodos son aproximadamente equivalente en términos de eficiencia.

El método de canales acoplados también se ha usado con potenciales simplificados. Como ya se ha dicho antes, la ventaja de usar estos potenciales idealizados, es que simplifican mucho los cálculos, permitiendo que gran parte de ellos puedan ser efectuados en forma analítica.

Chow y Thompsom [20] usan como potencial una pared dura corrugada con un potencial cuadrado atractivo al frente de la pared.

Otro modelo interesante, es el que recientemente ha resuelto J. Rössler y G. Martínez [40]; en este caso usó una pared dura con un potencial "delta de Dirac" atractivo al frente de la pared haciendo variar la intensidad de la "delta" periódicamente. Con este modelo se ha podido avanzar bastante en el entendimiento del fenómeno de las resonancias.

vi) *Otros métodos*

Por último, solo quisiéramos mencionar otros dos métodos que han sido usados para abordar el scattering de átomos sobre superficies y dar las referencias correspondientes.

El así llamado método GR desarrollado por García et al. [41-45] y el método desarrollado por J. Weare et al [22-46]

que consiste en un método de expansión para la amplitud de scattering.

CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis se ha elaborado un programa de computación (ver Apéndice C), que permite no sólo encontrar la intensidad de los diferentes picos de difracción sino que también la función de onda para el problema de scattering de átomos por una superficie cristalina.

Este programa de computación permitirá realizar estudios de la interacción gas-superficie y así avanzar en el estudio del scattering inelástico.

En el análisis de las resonancias ha habido algún progreso, entendiéndose mejor el origen del corrimiento y la separación de ellas. Sin embargo, el estudio de este fenómeno no está de ningún modo terminado; en efecto, el presente trabajo ha dado origen a nuevos estudios más básicos de este fenómeno [23] .

APENDICE A

Probabilidades de scattering

El objetivo de este apéndice es usar la ecuación (2.40) para encontrar la probabilidad P_{ν} de que la partícula incidente por el canal ν , sea observada en la región asintótica, es decir, para $z \rightarrow \infty$ en el canal (pico de difracción) ν .

En el estado estacionario se cumple la ecuación de continuidad

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \tag{1}$$

o equivalentemente

$$\int_S \vec{J} \cdot d\vec{s} = 0 \tag{2}$$

donde S es la superficie de un paralelepípedo que encierra una celda unitaria de la red superficial como se aprecia en la Figura 23.

Dada la periodicidad de la red, tenemos que el flujo neto correspondiente a la suma sobre los planos perpendiculares a la superficie es cero. El flujo a través de la superficie que coincide con el plano xy (ver Figura 23) es nulo, ya que las partículas no penetran al interior del cristal.

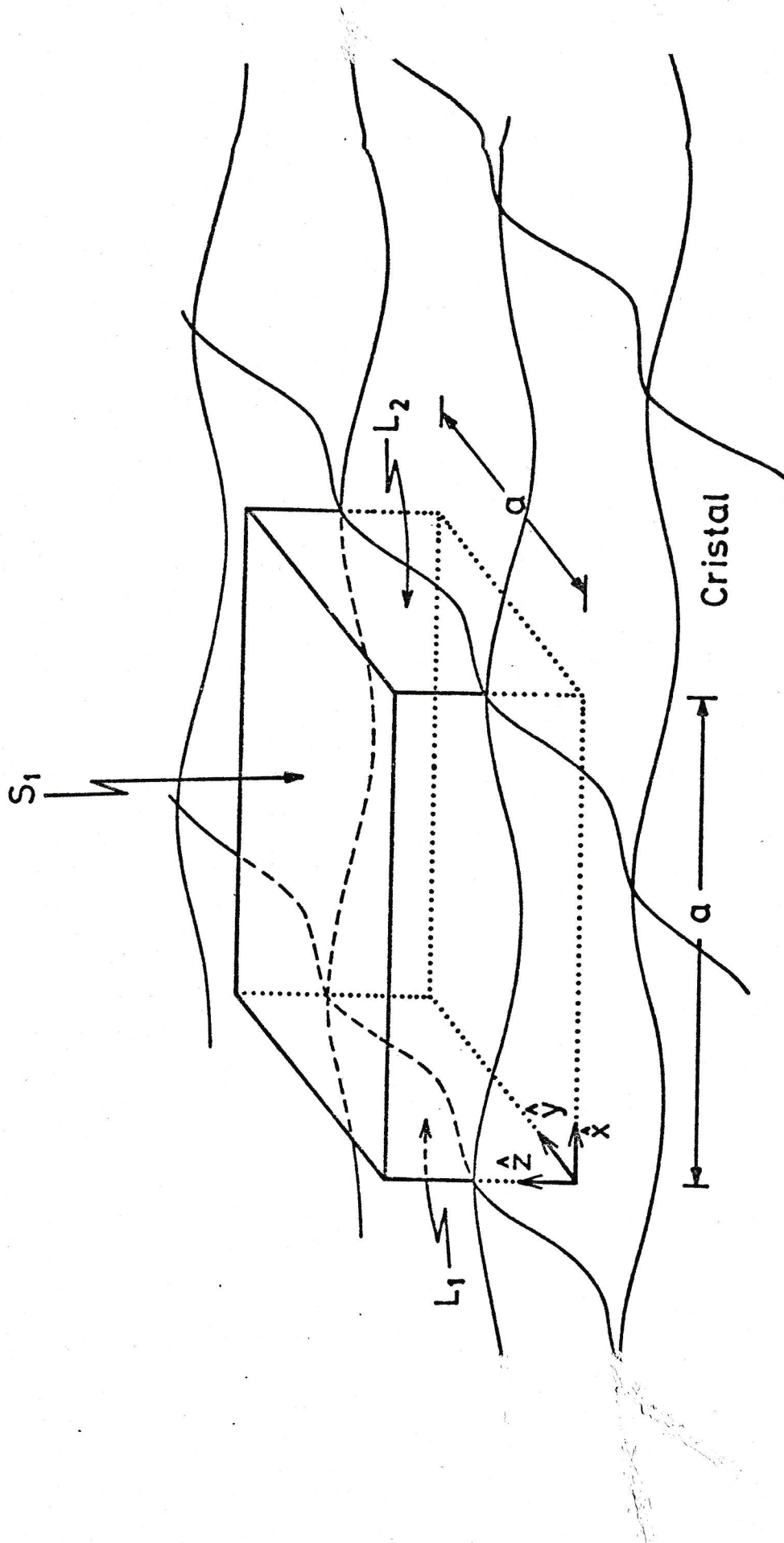


Figura 23. Paralelepípedo usado para calcular la corriente neta en el proceso de scattering.

La ecuación (2) por lo tanto se reduce a

$$\int_{S_1} \vec{J} \cdot d\vec{s} = \int_{S_1} J_z dx dy \quad (3)$$

Definamos

$$\vec{k}_{\nu,+} = (\vec{K} + \vec{G}_\nu, k_\nu) \quad (4a)$$

y

$$\vec{k}_{\nu,-} = (\vec{K} + \vec{G}_\nu, -k_\nu) \quad (4b)$$

Con estas definiciones podemos escribir la solución (2.40) de la siguiente forma:

$$\Phi_{\nu_0}(\vec{r}) = \sum_{\substack{\nu, s \\ (\nu \text{ abieto})}} A_{\nu s} e^{i \vec{k}_{\nu s} \cdot \vec{r}} \quad (5)$$

donde

$$s = \begin{cases} + \\ - \end{cases}$$

y

$$\begin{cases} A_{\nu,+} = A_{\nu_0,\nu} \\ A_{\nu,-} = \delta_{\nu_0,\nu} \end{cases} \quad (6a)$$

$$\begin{cases} A_{\nu,+} = A_{\nu_0,\nu} \\ A_{\nu,-} = \delta_{\nu_0,\nu} \end{cases} \quad (6b)$$

La corriente \vec{J} viene dada por

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2M} (\Phi_0 \vec{\nabla} \Phi_0^* - \Phi_0^* \vec{\nabla} \Phi_0) \quad (7)$$

Reemplazando (5) en (7) obtenemos

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2M} \sum_{\nu\mu st} \vec{k}_{\mu t} \left(A_{\nu s}^* A_{\mu t} e^{i(\vec{k}_{\mu t} - \vec{k}_{\nu s}) \cdot \vec{r}} + c.c. \right) \quad (8)$$

(cc= complejo conjugado) y por lo tanto para la componente \hat{z} se tiene

$$J_z = \frac{\hbar}{2M} \sum_{\nu\mu st} t k_{\mu} \left(A_{\nu s}^* A_{\mu t} e^{i(t k_{\mu} - s k_{\nu})z + i(\vec{G}_{\mu} - \vec{G}_{\nu}) \cdot \vec{R}} + c.c. \right) \quad (9)$$

Reemplazando (9) en (3) se encuentra

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^a \int_0^a J_z dx dy \\ &= \frac{\hbar}{2M} \sum_{\nu st} a^2 t k_{\nu} \left(A_{\nu s}^* A_{\nu t} e^{i k_{\nu}(t-s)z} + c.c. \right). \quad (10) \end{aligned}$$

Escribiendo la suma sobre t y sobre s explícitamente obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\hbar a^2}{2M} \sum_{\nu} k_{\nu} \left(A_{\nu+}^* A_{\nu+} - A_{\nu-}^* A_{\nu-} + A_{\nu-}^* A_{\nu+} e^{2i k_{\nu} z} - A_{\nu+}^* A_{\nu-} e^{-2i k_{\nu} z} + c.c. \right) \\ &= \frac{\hbar a^2}{2M} \sum_{\nu} 2k_{\nu} \left(|A_{\nu+}|^2 - |A_{\nu-}|^2 \right) \quad (11) \end{aligned}$$

de donde finalmente

$$\sum_{\nu} k_{\nu} |A_{\nu+}|^2 = \sum_{\nu} k_{\nu} |A_{\nu-}|^2 = \sum_{\nu} k_{\nu} \delta_{\nu\nu_0} = k_{\nu_0}. \quad (12)$$

El lado derecho de (12) corresponde al flujo incidente mientras que el lado izquierdo corresponde a la suma del flujo en los canales emergentes. Las probabilidades P_ν viene por lo tanto dada por

$$P_\nu = \frac{k_\nu}{k_{\nu_0}} |A_{\nu,+}|^2 = \frac{k_\nu}{k_{\nu_0}} |A_{\nu,\nu}|^2 \quad (13)$$

y reemplazando (13) en (12) se obtiene que

$$\sum_\nu P_\nu = 1 \quad (14)$$

APENDICE B.

B.1 Autovalores y autofunciones de los estados ligados de un potencial de Morse [47]

Consideremos el potencial de Morse de la ecuación (2.3)

$$V_0(z) = D e^{\alpha(z-z_0)} \left[e^{-\alpha(z-z_0)} - 2 \right]. \quad (1)$$

Realizando el cambio de variable $x = z - z_0$, la ecuación de Schrödinger a resolver es

$$\phi''(x) + \frac{2M}{\hbar^2} (\epsilon + 2D e^{-\alpha x} - D e^{-2\alpha x}) \phi(x) = 0. \quad (2)$$

Sea

$$\epsilon = - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (3)$$

y

$$P = \frac{2M}{\hbar^2} D \quad (4)$$

entonces (2) queda

$$\phi''(x) + (2P e^{-\alpha x} - P e^{-2\alpha x} - k^2) \phi(x) = 0 \quad (5)$$

Realicemos el cambio de variable

$$\xi = \frac{2\sqrt{P}}{\alpha} e^{-\alpha x} \quad (6)$$

y además definamos S y m por las relaciones

$$S = \frac{k}{\alpha} \quad (7a)$$

$$m = \frac{\sqrt{P}}{\alpha} - \left(s - \frac{1}{2}\right). \quad (7b)$$

Sea

$$\bar{\phi}(\xi) = \phi(x), \quad (8)$$

entonces la ecuación de Schrödinger (5) se transforma en

$$\bar{\phi}''(\xi) + \frac{1}{\xi} \bar{\phi}'(\xi) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{m+s-\frac{1}{2}}{\xi} - \frac{S^2}{\xi^2}\right) \bar{\phi}(\xi) = 0. \quad (9)$$

Haciendo la sustitución

$$\bar{\phi}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^S W(\xi) \quad (10)$$

se obtiene para $W(\xi)$ la ecuación hipergeométrica confluyente

$$W''(\xi) + \frac{2S+1-\xi}{\xi} W'(\xi) + \frac{m-1}{\xi} W(\xi) = 0. \quad (11)$$

La solución de (11), regular en $\xi = 0$ (es decir, para $x \rightarrow +\infty$), es

$$W(\xi) = {}_1F_1(-m+1, 2S+1; \xi). \quad (12)$$

Deseamos además que

$$\bar{\phi}(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0 \quad (13)$$

(lo que equivale a $\phi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$; por lo tanto sólo son aceptables soluciones polinomiales, es decir, m debe ser un entero positivo ($m = 1, 2, \dots$))

De las ecuaciones (7) obtenemos que

$$m = \frac{\sqrt{P}}{\alpha} - \left(\frac{\hbar k}{\alpha} - \frac{1}{2} \right) \quad (14)$$

o sea

$$\begin{aligned} \epsilon_m &= -\frac{\hbar^2 k^2}{2M} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\sqrt{P} - \left(m - \frac{3}{2}\right) \alpha \right)^2 \\ &= -D \left(1 - \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2MD}} \right)^2. \end{aligned} \quad (15)$$

El número de estados ligados es finito, pues debe cumplirse que

$$\left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2MD}} < 1. \quad (16)$$

Las funciones de onda $\bar{\phi}_m(\xi)$ vienen dadas por

$$\bar{\phi}_m(\xi) = A_m \xi^{S_m} e^{-\xi/2} {}_1F_1(-m+1, 2S_m+1; \xi) \quad (17)$$

con

$$S_m = \frac{\sqrt{2MD}}{\alpha \hbar} - \left(m - \frac{1}{2}\right). \quad (18)$$

Las constantes de normalización \bar{A}_m , se obtienen de la condición

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i(x) \phi_j(x) dx = \delta_{ij} . \quad (19)$$

Con el cambio de variables (6), (19) es equivalente a

$$\int_0^{\infty} \bar{\phi}_i(\xi) \phi_j(\xi) \frac{d\xi}{\xi} = \alpha \delta_{ij} . \quad (20)$$

La Tabla B1 muestra en forma explícita los autovalores, autofunciones y factores de normalización para $m = 1, 2, 3$.

B.2 Cálculo de $\langle l, i | \check{V}_1 | l', i' \rangle$.

Evaluemos los elementos de matriz

Se tiene (*)

$$\begin{aligned} \langle l, i | \check{V}_1 | l', i' \rangle &= \langle l, i | \sum_{x,z} |x,z\rangle \langle x,z | \check{V}_1 | \sum_{x',z'} |x',z'\rangle \langle x',z' | l', i' \rangle \\ &= \sum_{\substack{x,z \\ x',z'}} \langle l, i | x,z \rangle \langle x,z | \check{V}_1 | x',z' \rangle \langle x',z' | l', i' \rangle \end{aligned} \quad (21)$$

donde

$$\langle l, i | x,z \rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-i(\tilde{k}_x + \frac{2\pi}{a}l)x} \phi_i(z) \quad (22)$$

y

$$\sum_x = \frac{1}{a} \int_0^a dx \quad \gamma \quad \sum_z = \int_{-\infty}^{+\infty} dz$$

TABLA B.1

Autovalores ϵ_m , autofunciones $\bar{\phi}_m(\xi)$ y sus factores de normalización A_m para los tres primeros estados ligados de un potencial de Morse

m	ϵ_m	$\bar{\phi}_m(\xi)$	A_m
1	$-D(1 - \frac{\Lambda}{2})^2$	$A_1 \xi^{s_1} \exp(-\xi/2)$	$\left(\frac{\alpha}{\Gamma(2s_1)}\right)^{1/2}$
2	$-D(1 - \frac{3\Lambda}{2})^2$	$A_2 \xi^{s_2} \left(1 - \frac{\xi}{2s_2+1}\right) \exp(-\xi/2)$	$(2s_1-1) \left(\frac{\alpha(2s_1-2)}{\Gamma(2s_1)}\right)^{1/2}$
3	$-D(1 - \frac{5\Lambda}{2})^2$	$A_3 \xi^{s_3} \left(1 - \frac{2\xi}{2s_3+1} + \frac{\xi^2}{2(s_3+1)(2s_3+1)}\right) e^{-\xi/2}$	$2(2s_1-3)(s_1-1) \left(\frac{\alpha(2s_1-1)}{\Gamma(2s_1)}\right)^{1/2}$

(*) $\Lambda = s_1 + 1/2$

TABLA B.2

Elementos de matriz $V_{ii} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i(z) V_i(z) \phi_i(z) dz$

V_{ii}	1	2	3
1	$-2\beta \sqrt{D \epsilon_1 }$	$\frac{h^2}{M} \beta \alpha s_1^2 \sqrt{2s_1 - 2}$	$-\frac{h^2}{2M} \beta \alpha^2 (2s_1^2 - 2s_1 + 3) \sqrt{\frac{2s_1^2 - 5s_1 + 2}{2s_1^2 - 6s_1 + 5}}$
2	V_{12}	$-2\beta \sqrt{D \epsilon_2 }$	$\frac{h^2}{2M} \beta \alpha^2 (s_1 + 1) \sqrt{\frac{2(s_1 - 1)(2s_1^2 - 5s_1 + 2)}{2s_1^2 - 6s_1 + 5}}$
3	V_{13}	V_{23}	$-2\beta \sqrt{D \epsilon_3 }$

$$\langle xz | \check{V}_1 | x'z' \rangle = \delta(x-x') \delta(z-z') V_1(z) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right). \quad (23)$$

Al realizar las integraciones sobre dx , dx' y dz se obtiene

$$\begin{aligned} \langle l,i | \check{V}_1 | l',i' \rangle &= \frac{1}{2} (\delta_{l,l'+1} + \delta_{l,l'-1}) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \phi_i(z) V_1(z) \phi_{i'}(z) \\ &= \frac{1}{2} (\delta_{l,l'+1} + \delta_{l,l'-1}) V_{ii'} \quad . \end{aligned} \quad (24)$$

En (24) $V_{ii'}$ viene dado por

$$V_{ii'} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i(z) V_1(z) \phi_{i'}(z) dz \quad (25)$$

$$= \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}_i(\xi) \bar{V}_1(\xi) \bar{\phi}_{i'}(\xi) \frac{d\xi}{\xi} \quad (26)$$

donde (ver ecuaciones (B.6) y (2.6))

$$\bar{V}_1(\xi) = - \frac{\beta \alpha^2 \hbar^2}{4M} \xi^2. \quad (27)$$

En la Tabla B.2 se muestran los elementos de matriz $V_{ii'}$ calculados usando las funciones $\bar{\phi}_i(\xi)$ de la Tabla B.1 ($i = 1, 2, 3$).

APENDICE C

El Programa HEFLIQ2

C.1 *Organización del programa*

El programa HEFLIQ2 calcula la intensidad de los picos de difracción para el scattering de átomos por superficies cristalinas usando potenciales de interacción del tipo propuesto por Lenard, Jones y Devonshire.

El programa está escrito en lenguaje FORTRAN IV y ha sido ejecutado en el computador IBM 3270 de la Universidad de Chile.

La Figura C.1 muestra el diagrama de subprogramas e indica en que parte de la ejecución del programa son usados.

La función de cada una de las subrutinas y procesos indicados en el diagrama son las siguientes.

READ Subrutina que lee los parámetros que definen el problema de los canales a considerar en el cálculo. Además, calcula el vector de onda y los ángulos de cada haz emergente y también los estados ligados del potencial de Morse $V_0(z)$.

- MAWAFU Subrutina que realiza la integración de las ecuaciones diferenciales desacopladas (ver ecuación 3.14) desde Z_a hasta Z_f .
- COUPLED En esta parte del programa se realiza la integración de las ecuaciones diferenciales acopladas (ver ecuación 2.18) desde Z_i hasta Z_f .
- MATCHING Aquí se construyen las matrices $a_{\mu\nu}$, $b_{\mu\nu}$ (ver ecuaciones 2.33).
- CMINV Subrutina MINV de la S.S.P de IBM para invertir matrices usando el método de Gauss-Pivote, generalizada para matrices complejas. Se usa para invertir la matriz compleja $b_{\mu\nu}$
- INT-INTO Subrutinas que integran ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden mediante el método de ADAMS-MOULTON-ZONNEVELD (Predictor-Corrector). Para la integración de las ecuaciones diferenciales desacopladas estas subrutinas obtienen la información del potencial a través de la subrutina DMWF declarada EXTERNAL en MAWAFU. Para la integración de las ecuaciones diferenciales acopladas, las subrutinas INT e INTO obtienen la información de cómo se acoplan los distintos canales a través de la subrutina DERIV declarada EXTERNAL en el programa principal. La subrutina INTO

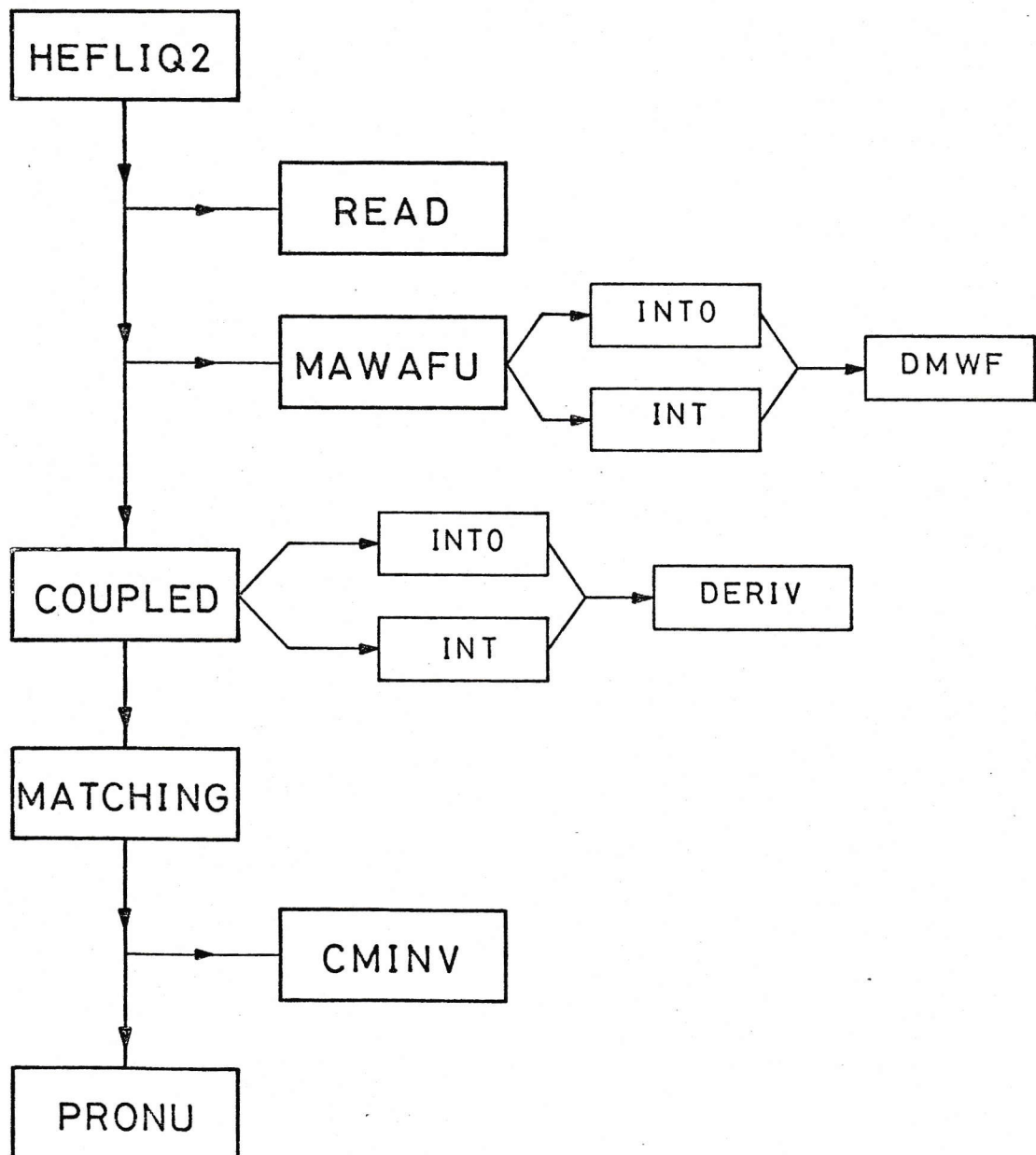


Figura C 1. Diagrama de subrutinas del Programa HEFLIQ2.

calcula los valores iniciales mientras que la integración propiamente tal es realizada por la subrutina INT.

C.2 *Observaciones generales*

El programa HEFLIQ2 puede ser modificado para el uso de otro tipo de potenciales de interacción. Es importante señalar que la subrutina DERIV debe modificarse para cada conjunto de canales que intervienen en un cálculo, ya que esta subrutina entrega la información de cómo se acoplan los canales considerados.

La precisión en la integración de las ecuaciones diferenciales, que se realiza con un método predictor-corrector, se fija mediante la variable EMAXO en el programa principal, es decir, EMAXO es la máxima diferencia permitida entre los dos valores que calcula INT para la función de onda en un punto z dado; para lograr cumplir este objetivo, la subrutina INT puede dividir el intervalo inicial de integración (que se fija con HPRINT) hasta en 1024 partes iguales. Para imprimir las funciones de onda, la variable lógica SWPR indica cuando la integración está en un paso que es múltiplo de HPRINT; la variable NPR leída desde el archivo de datos indica cada cuántos de éstos múltiplos de HPRINT se imprimirán los resultados de INT.

En el programa de HEFLIQ2 la integración de las ecuaciones desacopladas, que se realiza en la subrutina MAWAFU, no depende del parámetro de corrugación β , lo cual permite realizar los cálculos para distintos valores de β , suando una sola vez la subrutina MAWAFU. Esta operación se indica al programa a través de la variable alfanumérica TEXT, que indica que los resultados obtenidos por MAWAFU en el cálculo anterior se encuentran almacenadas en el archivo de entrada y salida de la unidad 3.

Para el uso de la subrutina CMINV el arreglo CB(MU, NU), que contiene la matriz $b_{\mu\nu}$, debe ponerse en un arreglo unidimensional XX(LNN), lo que se hace usando la convención indicada en la S.S.P de IBM[48] .

C.3 Entrada de DATOS

El archivo de entrada de datos (UNIDADES) posee registros de 80 caracteres.

Primer Registro:

TEXT	(A4) Contraseña que indica cuando se debe usar MAWAFU, si TEXT es distinto del usado en la ejecución anterior ejecutada MAWAFU.
D	(F5.2) Mínimo del potencial de Morse (meV)
ALFA	(F5.2) Inverso del rango del potencial de Morse (Å^{-1}).
ZO	(F5.2) Posición del mínimo de potencial (Å).

A	(F5.2) Distancia entre átomos de la red (Å).
E	(F5.2) Energía de la partícula incidente (meV)
THETA	(F5.2) Angulo entre el haz incidente y la normal al plano (grados).
PHI	(F5.2) Angulo azimutal de incidencia (grados).
ZI	(F5.2) Z_i , punto de partida de la integración al interior del cristal (Å).
ZF	(F5.4) Z_f , punto de ensamble (ver Cap. 3) (Å).
ZA	(F5.4) Z_a , punto de partida para la integración realizada por MAWAFU (Å).
NC	(I3) número de canales que se incluyen en el cálculo.
PM	(F10.5) $\frac{2M}{E}$, donde M es la masa de la partícula incidente ($\text{Å}^2/\text{meV}$).
BETA	(F5.2) β , rugosidad de la superficie.
NP	(I3) indica cada cuantos pasos de integración (múltiplos de HPRINT) se imprimen las funciones φ_{uv} , φ_v y sus derivadas.
NC	(I3) indica cual de los NC canales es el canal especular.

Después de este primer registro deben incluirse NC registros que indican los vectores de red recíproca asociados

a cada canal. En el registro NCE de estos NC registros se debe tener el vector (0, 0), indicando el canal espejular. En cada registro se leen los dos números reales (m, n) en el formato (2F3.0).

IF (ABS(Z-ZF).GT.0.001) GOTO 9

MATCHING

```

DO 12 NU=1,NC
  NUU=2*NU
  IF (FKZ2(NU).LT.0.0) GOTO 13
  WF1=CMPLX(WFM(NU,1),0.0)
  WF2=CMPLX(WFM(NU,2),0.0)
  DW1=CMPLX(DWFM(NU,1),0.0)
  DW2=CMPLX(DWFM(NU,2),0.0)
  CI=CMPLX(0.0,1.0)
  AUX1=WF1-CI*WF2
  AUX2=DW1-CI*DW2
  AUX3=0.5*CI*(Y(NUU)*AUX2-Y(NUU+1)*AUX1)/SQRT(FKZ2(NU))
  CA(MU,NU)=AUX3
  CB(MU,NU)=CONJG(AUX3)
  GOTO 12
  BUX=1.0/(WFM(NU,1)*DWFM(NU,2)-WFM(NU,2)*DWFM(NU,1))
  CA(MU,NU)=BUX*(Y(NUU+1)*WFM(NU,1)-Y(NUU)*DWFM(NU,1))
  CB(MU,NU)=BUX*(Y(NUU)*DWFM(NU,2)-Y(NUU+1)*WFM(NU,2))
CONTINUE
CONTINUE

```

MATRIX INVERSION

```

DO 15 I=1,NC
  DO 15 J=1,NC
    LNN=J+(I-1)*NC
    XX(LNN)=CB(I,J)
  CALL CMINV(XX,NC,DD,LLL,MMM)
  DO 16 I=1,NC
    DO 16 J=1,NC
      LNN=J+(I-1)*NC
      CC(I,J)=XX(LNN)
    CONTINUE

```

PRONU

C
C
C
C

13

12

C
C
C
C
C

15

C
C

16

C
C
C

```

5 DWFM(1,1)=DUMPA(NUJ)
6 NJJJ=NJJ+NC
7 DWFM(1,2)=DUMPA(NUJJ)
8 CONTINUE

```

COUPLED

INTEGRATION OF COUPLED CHANNEL DIF. EQUATIONS

```

9 NO= 2*NC
10 HPRINT=0.1
11 DO 6 MU=1,NC
12 Z=Z1
13 DO 7 II=1,NO
14 Y(II)=0.0
15 MUU=2*MU-1
16 Y(MUU+1)=0.001

```

```

17 CALL INT(N0,Z,DERIV,Y,DY,ZZ,HPRINT)

```

FOR WRITING Y(NU),DY(NU),REMOVE CC THE FOLLOWING STATEMENTS

```

18 WRITE(6,100)
19 WRITE(6,200) Z,MU,U0,U1
20 DO 8 NU=1,NC
21 NUU=2*NU-1
22 WRITE(6,300)NU,Y(NUU),Y(NUU+1),DY(NUU+1)
23 NPR=0
24 CONTINUE
25 CALL INT(Z,DERIV,Y,DY,ZZ,SWPR)
26 IF (SWPR) NPR=NPR+1
27 IF (ARS(Z-ZF).LT.0.00001) GOTO 10
28 IF (NPR.EQ.NP) GOTO 10
29 GOTO 9
30 WRITE(6,200) Z,MU,U0,U1
31 DO 11 NU=1,NC
32 MUU=2*NU-1
33 WRITE(6,300) NUU,Y(NUU),Y(NUU+1),DY(NUU+1)
34 NPR=0
35 CONTINUE
36
37
38
39
40

```



```

C
C
C CHANNEL PROBABILITIES
WRITE(6,500)
SUMITA=0.0
DO 17 NU=1,NC
  CP=(0.0,0.0)
  IF(FKZ2(NU).LT.0.0) GOTO 17
  DO 18 MU=1,NC
    CP=CC(NCE,MU)*CA(MU,NU)+CP
  CONTINUE
  CPP=CP*CONJG(CP)*SORT(FKZ2(NU)/FKZ2(NCE))
  WRITE(6,600) NU,CP,CPP,AN(NU),AM(NU)
  SUMITA=CPP+SUMITA
CONTINUE
WRITE(6,700) SUMITA
GOTO 1
100 FORMAT(//40X,'INTEGRATION THE COUPLED WAVE FUNCTION')
200 FORMAT(//10X,'Z = ',F5.2,25X,' MU = ',E12.5,5X,' UJ = ',E12.5,5X,
1 MU) = ',E12.5,//,33X,'PHI(MU,NU)',10X,'DOPHI(MU,NU)',10X,'DOPHI(MU
2 NU)',/)
300 FORMAT(20X,'MU = ',E12.5X,E12.5,10X,E12.5,10X,E12.5)
500 FORMAT(//,30X,'CHANNEL',10X,'PROBABILITY DENSITY',13X,'PROBAEI
2 LITY',5X,'(M,N)',/)
600 FORMAT(//,33X,'Z',F5.2(2X,E12.5),10X,E12.5,6X,'( ',2F3.0,')')
700 FORMAT(//,60X,'TOTAL PROBABILITY = ',E10.3)
END

```

SUBROUTINE READ

ESTA SUBROUTINA LEE PARAMETROS DEL POTENCIAL DE MORSE
 PARAMETROS DE LA SUPERFICIE Y VECTORES DE RED RECIPROCA
 ASOCIADOS A LOS CANALES DE SCATTERING
 E = ENERGIA INCIDENTE
 D , ALFA , 70 = PARAMETROS DEL POTENCIAL DE MORSE
 PM = 2*M/4*BARRA**2 (1/MILLIEV*A**2)
 BETA = PARAMETRO DE ACOPLAMIENTO
 NP = CADA CUANTO S HPRINT SE IMPRIME FUNCION ONDA
 A = PARAMETRO DE RED
 THETA , PHI = ANGULOS DE INCIDENCIA
 NC = NUMERO DE CANALES QUE SE CONSIDERAN
 NCE = NUMERO DEL CANAL ESPECULAR
 Z1,ZF,ZA, PARAMETROS DE INTEGRACION
 COMMON/UNO/ TEXT,Z1,NP,NCE,AN(100),AM(100)
 COMMON/DOS/ NC,ZF
 COMMON/TRES/ FKZ2(100),ALFA,FF,ZO,ZA,BETA
 COMMON/PREC/ EMAXO,NEG
 READ(5,100) TEXT,D,ALFA,ZO,A,E,THETA,PHI,ZI,ZF,ZA,NC,PM,BETA,ND,NC
 15
 IF(BETA.GT.1.0) CALL EXIT
 PI=3.14159265354

EMAXO= PRECISION DE INTEGRACION

EMAXO=1.00001
 THETA=THETA*PI/180.
 DO 1 I=1,NC
 READ(5,200) AN(I),AM(I)
 WRITE(6,300)
 WRITE(6,400) E,THETA,PM,PHI,ALFA,D,ZO,BETA,A,ZI,ZF,ZA
 PHIR=PHI*PI/180.
 NEG=1

CALCULO DE MOMENTOS Y ANGULOS EMERGENTES

FK20=E*PM
 FK0=SQRT(FK20)
 FKZ0=FK0*COS(THETAR)
 FKX0=FK0*SIN(THETAR)*SIN(PHIR)
 FKX0=FK0*SIN(THETAR)*COS(PHIR)
 G = 2.*PI/A
 WRITE(6,500)
 WRITE(6,600)

```

DO 2 I=1,NC
FKX=FKX0+AM(I)*G
FKY=FKY0+AM(I)*G
FKZ2(I)=FKZ0-FKX**2-FKY**2
IF (FKZ2(I).LT.0.0) GO TO 6
FKZ=SQRT(FKZ2(I))
IF (FKX.EQ.0.0) GO TO 3
CUO=FKY/FKX
PHID=ATAN(CUO)
CUO=FKX/(FKZ*COS(PHID))
THETAD=ATAN(CUO)*180./PI
PHID=PHID*180./PI
GO TO 4
3 PHID=0.0
CUO=FKY/FKZ
THETAD=ATAN(CUO)*180./PI
IF (I.EQ.NC) GO TO 5
WRITE(6,700) I,AM(I),AM(I),FKX,FKY,FKZ,FKZ2(I),THETAD,PHID
GO TO 2
5 WRITE(6,800) I,AM(I),AM(I),FKX,FKY,FKZ,FKZ2(I),THETAD,PHID
GO TO 2
6 WRITE(6,900) I,AM(I),AM(I),FKX,FKY,FKZ2(I)
CONTINUE
WRITE(6,500)
C
C NIVELES LIGADOS POTENCIAL DE MORSE.
AR=ALEA/SORT(PM*P)
NR=IFIX(1./AR*0.5)+1
EG=0*PM
WRITE(6,1000)
DO 7 I=1,NB
PL=FF*(1.- (FLOAT(I-1)+0.5)*AR)**2
J=I+1
WRITE(6,1100) J, EL
CONTINUE
7 100 FORMAT(A4,10F5.2,13,F10.8,F5.3,2I3)
200 FORMAT(//,45X,'SCATTERING OF HF(4) ON LI F CRYSTAL',//)
300 FORMAT(54X,'BEAM PARAMETERS',//)
400 FORMAT(//,10X,'PM = ',F8.4,5X,'(MILLIEV)',38X,'THETA = ',F8.4,5X,'(D
DEGFES)',10X,'PM = ',F8.4,5X,'(MILLIEV)',38X,'PHI = ',
3F8.4,5X,'(DEGREES)',//49X,'MORSE POTENTIAL PARAMETER',//9X,'ALFA
4= ',F8.4,5X,'(1./ANGSTROM)',33X,'D = ',F8.4,5X,'(MILLIEV)',70X,
5120 = ',F8.4,5X,'(ANGSTROM)',36X,'BETA = ',F8.4,5X,'(1./ANGSTROM)',36X,

```

```

64, 5X, 'CRYSTAL PARAMETER', ///51X, 'INTEGRATION PARAMETER', ///20X, '
771 = ', F8.2, 10X, 'ZF = ', F8.2, 10X, 'ZA = ', F8.2, //)
500 FORMAT(1X, I32(1H*))
600 FORMAT(1X, *, 130X, ', ', /1X, '*', 8X, 'I', 8X, '(M,N)', 9X, ' KY', 12X,
1, KY', 12X, ' KZ', 12X, ' KZ**2', 7X, 'THETA', 5X, ' PHI', 28X, '*')
700 FORMAT(/1X, *, 7X, 12, 6X, '( ', 2F3.0, ')', 4(4X, E11.4), 2(4X, F6.2), 27X,
1, '*')
800 FORMAT(/1X, *, 7X, 12, 6X, '( ', 2F3.0, ')', 4(4X, E11.4), 2(4X, F6.2), 5X,
1, 'SPECULAR CHANNEL', 6X, '*')
900 FORMAT(/1X, *, 7X, 12, 6X, '( ', 2F3.0, ')', 2(4X, E11.4), 19X, E11.4, 25X,
1, 'CLOSED CHANNEL', 8X, '*')
1000 FORMAT(/53X, 'BOUND STATE ENERGIES', /)
1100 FORMAT(55X, 'E', 11, ' = ', E12.5)
RETURN
END

```

```

C SUBROUTINE MANAFU(WFM,DWFM)
C SUBROUTINA QUE INTEGRA ECUACIONES DESACOPLADAS
C DESDE ZA HASTA ZF
C
C COMMON/DO5/ NC,ZF
C COMMON/UNO/ TEXT,ZI,MP,NCE,AN(100),AM(100)
C COMMON/TRES/ FKZ2(100),ALFA,FF,ZO,ZA,BETA
C COMMON/CIENCG/ N
C COMMON/PREC/ FMA X0,NEG
C DIMENSION DUMPA(50),WFM(100,2),DWFM(100,2),Y(4),DY(4)
C REAL*8 HPRINT,ZZ(128)
C LOGICAL SWPR
C EXTERNAL DWWF
C
C CONDICIONES DE INTEGRACION
C
C HPRINT=0.1
C EMAXO=0.00001
C NEG=-1
C
C DO 1 N=1,NC
C YF(FKZ2(N),LT,0,0) GOTO 2
C FK=SOBT(FKZ2(N))
C X=FK*ZA
C
C CONDICIONES DE BORDE EN ZA
C
C Y(1)= COS(X)
C Y(2)= FK*SIN(X)
C Y(3)= SIN(X)
C Y(4)=-FK*COS(X)
C T=ZA
C
C CALL INTD(4,T,DWWF,Y,DY,ZZ,HPRINT)
C
C WRITE(6,100) N
C GOTO 4
C
C 5 CALL INT(T,DWWF,Y,DY,ZZ,SWPR)
C IF(SWPR) GOTO 3
C
C 4 Z=T
C 3 WRITE(6,200) T,Y

```

```

IF(Z.GT.6.5) CALL EXIT
IF(Z.GT.ZF) GOTO 5
GOTO 6
2  XI=SQRT(ABS(FKZ2(N)))
   Y(1)=EXP(XI*ZA)
   Y(2)=XI*EXP(XI*ZA)
   Y(3)=EXP(-XI*ZA)
   Y(4)=-XI*EXP(-XI*ZA)
GOTO 9
6  WFM(N, 1)=Y(1)
   DWFM(N, 1)=Y(2)
   WFM(N, 2)=Y(3)
   DWFM(N, 2)=Y(4)
1  CONTINUE
   GRABA EN UNIDAD 3
   DUMPA(1)=TEXT
   DO 8 I=1,NC
     J=I+1
     DUMPA(J)=WFM(I, 1)
     NJ=J+NC
     DUMPA(NJ)=WFM(I, 2)
     NJJ=NJ+NC
     DUMPA(NJJ)=DWFM(I, 1)
     NJJJ=NJJ+NC
     DUMPA(NJJJ)=DWFM(I, 2)
8  REWIND 3
   WRITE(3) DUMPA
   REWIND 3
   FMAXO=0.00001
   NEC=1
100 FORMAT(/ / 1X, 'INTEGRATION OF UNCOUPLED, LINEARLY INDEPENDENT WAVES'
24X, / 1X, 'WF(1)', 10X, 'DWF(1)', 10X, 'WF(2)', 10X, 'DWF(2)')
200 FORMAT(/ / 1X, '3, 4(4X, E12.5)')
300 FORMAT(/ / 2X, 'CLOSED CHANNEL (N=, I2, ), 'WF(1)=', E12.5, 5X,
1, 'DWF(1)=', E12.5/27X, 'WF(2)=', E12.5/27X, 'DWF(2)=', E12.5/)
RETURN
END

```



```

NK = N
DO 80 K=1,N
NK =NK+N
L(K)=K
M(K)=K
KK=NK+K
RIGA=A(KK)
DO 20 J=K,N
IZ=NK*(J-I)
DO 20 I=K,N
IJ=IZ+I
10 IF(CABS(BIGA)-CABS(A(IJ))) 15,20,20
15 BIGA=A(IJ)
L(K)=I
M(K)=J
20 CONTINUE
J=L(K)
IF(J<K) 35,35,25
25 KI=K-N
DO 30 I=1,N
KI=KI+M
HOLD=-A(KI)
JI=KI-K+J
A(KI)=A(JI)
A(JI)=HOLD
30 I=M(K)
35 IF(I<K) 45,45,33
33 JP=N*(I-1)
DO 40 J=1,N
JK=NK+J
JI=JP+J
HOLD=-A(JK)
A(JK)=A(JI)
A(JI)=HOLD
40 IF(CABS(RIGA)) 48,46,48
45 DE(0,0,0)
46 DO 55 I=1,N
48 IF(I<K) 50,55,50
50 IK=NK+I
A(IK)=A(IK)/(RIGA)
55 CONTINUE
DO 65 I=1,N
IK=NK+I
HOLD=A(IK)
IJ=I-N

```



```

60 DO 65 J=1,N
    IJ=IJ+N
    IF(I-K) 60,65,60
    IF(J-K) 62,65,62
62 KJ=I-J-I+K
    A(IJ)=HOLD*A(KJ)+A(IJ)
    CONTINUE
65 KJ=K-N
    DO 75 J=1,N
        KJ=KJ+N
        IF(J-K) 70,75,70
70 A(KJ)=A(KJ)/BIGA
75 CONTINUE
    D=D*BIGA
    A(KK)=1.0/BIGA
80 CONTINUE
    K=N
100 K=(K-1)
    IF(K) 150,150,105
105 I=L(K)
    IF(I-K) 120,120,108
108 JO=N*(K-1)
    JI=N*(I-1)
    DO 110 J=1,N
        JK=JO+J
        HOLD=A(JK)
        JI=JP+J
        A(JK)=A(JI)
110 A(JI)=HOLD
120 J=M(K)
    IF(J-K) 100,100,125
125 KI=K-N
    DO 130 I=1,N
        KI=KI+N
        HOLD=A(KI)
        JI=KI-K+J
        A(KI)=A(JI)
130 A(JI)=HOLD
        GO TO 100
150 RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE INT(ND, X, DERT, Y, F, T, HPRO)
COMMON/PRFC/ EMAX, NEG
COMMON/INTC/ IPMX, AREF, EMAX, SSSP, HFAC, SWAM, SWEX
COMMON/INTP/ HPR, XX, N, EUB, ELB, IP, IT, NRKS, SWIN
DIMENSION Y(1), F(1), T(8,1)
LOGICAL SWAM, SWEX, SWIN
INTEGER HEAC
DOUBLE PRECISION T, HPRO, HPR, XX
EXTERNAL DERT
IF (EMAXO.LT.1.0E-6) EMAXO=1.0E-6
IF (EMAXO.GT.1.0E-2) EMAXO=1.0E-2
EMAX=EMAXO
IPMX=1024
AREF=1.0
WRITE(6,1) EMAX
1 FORMAT(//IX, 'INTEGRATION ACCURACY=', E9, 2//)
SSSR=100.0
HEAC=2
SWAM=.TRUE.
SWEX=.TRUE.
DO 100 J=1, 8
  DO 200 I=1, N
    T(J, I)=0.0D0
CONTINUE
HPR=HPRO
XX=DBLE(X)
N=NO
EUB=EMAX
ELB=EMAX/SSSP
IP=1NEG
IT=0
NRKS=0
SWIN=SWEX
CALL DERT (X, Y, F)
DO 9 I=1, N
  T(S, I)=DBLE(Y(I))
CONTINUE
RETURN
END

```

C
C
C
2000
1000
9
C
C
C

```

SUBROUTINE INT(X, DERT, Y, F, T, SWPR)
COMMON/INTC/ IPMX, AREF, EMAX, SSSR, HFAC, SWAM, SWEX

```

```

COMMON /INTP/ HPR, XX, N, EUB, ELR, IP, IT, NRKS, SWIN
DIMENSION Y(1), F(1), I(8,1)
LOGICAL SWAM, SWEX, SWIN
INTEGER HPR, HPRC
DOUBLE PRECISION T, HPR, XX
DOUBLE PRECISION D, H
EXTERNAL DER1
FORMAT (36H0 CANNOT DECREASE H BECAUSE OF HMIN. ,1PE16.8,
6000 I
CONTINUE
SWPR=.FALSE.
TEST=.0
H=HPR/DBLE(FLOAT(IP*24))
IF ((NRKS .LT. 3) .OR. (.NOT. SWAM)) GO TO 300
C
C
C ADAMS MOULTON STEP.
100 CONTINUE
DO 109 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(4,I)=D
Y(I)=SNGL(T(5,I))+H*(
55.000*D-59.000*T(3,I)+37.000*T(2,I)-9.000*T(1,I))
109 CONTINUE
X=SNGL(XX+24.000*H)
CALL DERT (X, Y, F)
DO 119 I=1,N
D=DBLE(F(I))
D=(T(5,I)+H*(9.000*D+19.000*T(4,I)-5.000*T(3,I)+T(2,I)))
F=ABS(SNGL(D)-Y(I))/14.0
TEST=AMAX1(APEF,ABS(SNGL(D))),TEST)
CONTINUE
GO TO 300
119
C
C ZONNEVELD STEP.
200 CONTINUE
DO 209 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(4,I)=D
1
Y(I)=SNGL(T(5,I)+H*(12.000*D))
CONTINUE
X=SNGL(XX+12.000*H)
209
C

```

```

CALL DERI (X,Y,F)
DO 219 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(6,I)=D
2
C
Y(I)=SNGL(T(5,I))+H*(12.0D0*D))
CONTINUE
219 CALL DERI (X,Y,F)
DO 229 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(7,I)=D
3
C
Y(I)=SNGL(T(5,I))+H*(24.0D0*D))
CONTINUE
229 X=SNGL(XX+24.0D0*H)
CALL DERI (X,Y,F)
DO 239 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(8,I)=D
4
C
Y(I)=SNGL(T(5,I))+H*(
239 2.75D0*T(4,I)+5.25D0*T(6,I)+9.75D0*T(7,I)-0.75D0*D))
CONTINUE
X=SNGL(XX+18.0D0*H)
CALL DERI (X,Y,F)
DO 249 I=1,N
D=DBLE(F(I))
F=ABS(SNGL(H*(-16.0D0*T(4,I)+48.0D0*T(6,I)+48.0D0*T(7,I)
249 +48.0D0*T(8,I)-128.0D0*D)))
5
C
D=(T(5,I)+H*(4.0D0
C *T(4,I)+ 8.0D0*T(6,I)+ 8.0D0*T(7,I)+ 4.0D0*T(8,I)))
T(6,I)=D
TEST=AMAX1(E/AMAX1(AREF,ABS(SNGL(D))),TEST)
CONTINUE
249
C
C BOTH ADAMS-MOULTON AND ZONNEVELD METHODS CONTINUE FROM HERE
C
300 CONTINUE
X=SNGL(XX+24.0D0*H)
IF (TEST.LE. FUB) GO TO 310
IF (IP*HFAC .GT. IP4X) GO TO 309
C
C REPEAT STEP WITH SMALLER H.
C

```



```
MPK(S)=J  
IP=IP/HFAC  
IT=IT/HFAC  
RETURN
```

```
PROCEED TO NEXT STEP WITH SAME H.
```

```
CONTINUE  
DO 339 I=1,N  
T(1,I)=T(2,I)  
T(2,I)=T(3,I)  
T(3,I)=T(4,I)  
CONTINUE  
RETURN  
END
```

```
C  
C  
C 330
```

```
339
```

```

SUBROUTINE DMWF(T,Y,DY)
THIS SUBROUTINE CALCULATES DERIVATIVES OF THE UNCOUPLED
LINEARLY INDEPENDENT WAVE FUNCTIONS
COMMON/CINCC/ N
COMMON/TRES/ FKZ2(100),ALFA,FF,ZO,ZA,BETA
DIMENSION Y(1),DY(1)
Z=T
EE3=EXP(ALFA*(ZO-Z))
UO=FF*EE3*(EE3-2.0)
AUX=UO-FKZ2(N)
DY(1)=Y(2)
DY(2)=Y(1)*AUX
DY(3)=Y(4)
DY(4)=Y(3)*AUX
RETURN
END

```

C
C
C

```

SUBROUTINE DERIV(Z,Y,DY)
THIS SUBROUTINE EVALUATE THE DERIVATE OF THE COUPLED CHANNEL
WAVE FUNCTION
COMMON/TRES/ FKZ2(100),ALFA,FF,ZO,ZA,BETA
COMMON/CUATRC/UO,U1P
DIMENSION Y(1),DY(1)
EE3=EXP(ALFA*(ZO-Z))
FFR=FF*EE3
UO=FFR*(EE3-2.0)
U1P=-BETA*FF*(EE3)**2
DY(1)=Y(2)
DY(2)=(UO-FKZ2(1))*Y(1)+U1P*(Y(15)+Y(17)+Y(13)+Y(5))
DY(3)=Y(4)
DY(4)=(UO-FKZ2(2))*Y(3)+U1P*(Y(19)+Y(11)+Y(5)+Y(15))
DY(5)=Y(6)
DY(6)=(UO-FKZ2(3))*Y(5)+U1P*(Y(1)+Y(3)+Y(7)+Y(9))
DY(7)=Y(8)
DY(8)=(UO-FKZ2(4))*Y(7)+U1P*(Y(5)+Y(11))
DY(9)=Y(10)
DY(10)=(UO-FKZ2(5))*Y(9)+U1P*(Y(5)+Y(13))
DY(11)=Y(12)

```

C
C
C

C

```

DY(12)=(U0-FKZ2(6))*Y(11)+UIP*(Y(3)+Y(23)+Y(7))
DY(13)=Y(14)
DY(14)=(U0-FKZ2(7))*Y(13)+UIP*(Y(21)+Y(1)+Y(9))
DY(15)=Y(16)
DY(16)=(U0-FKZ2(8))*Y(15)+UIP*(Y(25)+Y(27)+Y(1)+Y(3))
DY(17)=Y(18)
DY(18)=(U0-FKZ2(5))*Y(17)+UIP*(Y(29)+Y(25)+Y(21)+Y(1))
DY(19)=Y(20)
DY(20)=(U0-FKZ2(10))*Y(19)+UIP*(Y(27)+Y(31)+Y(3)+Y(23))
DY(21)=Y(22)
DY(22)=(U0-FKZ2(11))*Y(21)+UIP*(Y(35)+Y(17)+Y(13)+Y(35))
DY(23)=Y(24)
DY(24)=(U0-FKZ2(12))*Y(23)+UIP*(Y(19)+Y(41)+Y(11)+Y(37))
DY(25)=Y(26)
DY(26)=(U0-FKZ2(13))*Y(25)+UIP*(Y(43)+Y(33)+Y(17)+Y(15))
DY(27)=Y(28)
DY(27)=(U0-FKZ2(14))*Y(27)+UIP*(Y(23)+Y(45)+Y(15)+Y(19))
DY(29)=Y(30)
DY(29)=(U0-FKZ2(15))*Y(29)+UIP*(Y(47)+Y(43)+Y(39)+Y(17))
DY(31)=Y(32)
DY(32)=(U0-FKZ2(16))*Y(31)+UIP*(Y(45)+Y(49)+Y(19)+Y(41))
DY(33)=Y(34)
DY(33)=(U0-FKZ2(17))*Y(33)+UIP*(Y(25)+Y(27))
DY(35)=Y(36)
DY(36)=(U0-FKZ2(18))*Y(35)+UIP*(Y(21))
DY(37)=Y(38)
DY(38)=(U0-FKZ2(15))*Y(37)+UIP*(Y(23))
DY(39)=Y(40)
DY(40)=(U0-FKZ2(20))*Y(39)+UIP*(Y(29)+Y(21))
DY(41)=Y(42)
DY(42)=(U0-FKZ2(21))*Y(41)+UIP*(Y(31)+Y(23))
DY(43)=Y(44)
DY(44)=(U0-FKZ2(22))*Y(43)+UIP*(Y(29)+Y(25))
DY(45)=Y(46)
DY(46)=(U0-FKZ2(23))*Y(45)+UIP*(Y(27)+Y(31))
DY(47)=Y(48)
DY(48)=(U0-FKZ2(24))*Y(47)+UIP*(Y(29))
DY(49)=Y(50)
DY(50)=(U0-FKZ2(25))*Y(49)+UIP*(Y(21))
RETURN
END

```


SCATTERING OF HE(4) ON LIF CRISTAL

BEAM PARAMETERS

E = 62.6000 (MILLIEV) THETA = 55.0000 (DEGREES)
PHI = 1.9151 (1./MILLIEV**2) PHI = 45.0000 (DEGREES)

ALFA = 1.1000 (1./ANGSTROM) BETA = 7.6300 (MILLIEV)
Z0 = 1.0000 (ANGSTROM) BETA = 0.0700

A = 2.84 CRYSTAL PARAMETER

MORSE POTENTIAL PARAMETER

INTEGRATION PARAMETER

ZI = -0.60 ZF = 3.00 ZA = 6.00

Table with 10 columns: I (M,N), KX, KY, KZ, KZ**2, THETA, PHI. It lists 25 rows of data for different scattering orders and angles, including a 'SPECULAR CHANNEL' entry at row 12.

BOUND STATE ENERGIES

E0 = -0.10710E 02
 E1 = -0.41204E 01
 E2 = -0.11506E 01

CHANNEL	PRCBABILITY DENSITY	PRCBABILITY	(N,M)
1	-0.31722E 00	0.92136E-01	(-1. 0.)
2	-0.31722E 00	0.92135E-01	(C.-1.)
3	0.44424E 00	0.54805E 00	(C. 0.)
4	-0.21712E 00	0.90668E-01	(1. 0.)
5	-0.21711E 00	0.90682E-01	(C. 1.)
6	0.88682E-01	-0.47778E-01	(1.-1.)
7	0.88677E-01	-0.47778E-01	(-1. 1.)
8	-0.15622E 00	-0.74135E-01	(-1.-1.)
9	-0.10948E 00	-0.74231E-01	(-2. 0.)
10	-0.10948E 00	-0.74234E-01	(C.-2.)
11	-0.45075E-01	-0.11987E-01	(-2. 1.)
12	-0.45076E-01	-0.11987E-01	(1.-2.)
13	0.84599E-01	-0.45895E-01	(-2.-1.)
14	0.84600E-01	-0.45894E-01	(-1.-2.)
15	0.34597E-01	-0.29775E-01	(-3. 0.)
16	0.34598E-01	-0.29774E-01	(C.-3.)
17	-0.34774E-01	0.46080E-01	(-2.-2.)
18	-0.12433E-01	-0.84199E-02	(-2. 2.)
19	-0.12430E-01	-0.84215E-02	(2.-2.)
20	0.94680E-03	-0.19323E-01	(-3. 1.)
21	0.94612E-03	-0.19323E-01	(1.-3.)
22	-0.31553E-02	0.42627E-01	(-3.-1.)
23	-0.31556E-02	0.42627E-01	(-1.-3.)
24	-0.41751E-03	0.14197E-01	(-4. 0.)
25	-0.41779E-03	0.14197E-01	(C.-4.)

TOTAL PROBABILITY = 1.001

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. G. Boato, P. Cantini y R. Tatarek, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 887
7. P. Cantini y R. Tatarek, Surf. Sci. 63 (1977) 104
8. B.F. Mason y B.R. Williams, Surf. Sci. 75 (1978) L786
9. D.R. Miller y J.M. Horne, Proc. 7th Intern. Vac. Congr. (Viena) (1977)
10. H. Frank, H. Hoinkes y W. Wilsch, Surf. Sci. 63 (1977) 121
11. B.R. Williams, Journal Chem. Phys. 55 (1971) 3220
12. H. Nahr, Lectures presented at an international course Trieste, 16 Hanuary - 10 April 1974. Surface Science Vol II IAEA
13. N. Cabrera, V. Celli, F.O. Goodman y R. Manson, Surf. Sci. 19 (1970) 67

14. M. Lagos, Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias, Un
versidad de Chile (1975)
15. J.E. Lennard-Jones y A.F. Devonshire, Nature 137 (1936)
1069. Film on Solid Surfaces, Cap. 2. J.G. Dash, Acad.
Press (1975)
16. G. Wolken, Journal Chem. Phys. 58 (1973) 3047
17. H. Chow y E.D. Thompson, Surf. Sci. 59 (1976) 225
18. P. Ring, H. Massmann y J.O. Rasmussen, Nucl. Phys. A
296 (1978)
19. K. Alder y A. Winther, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.
32, N°8 (1960)
20. H. Chow y E.D. Thompson, Surf. Sci. 54 (1976) 269
21. H. Chow y E.D. Thompson, Surf. Sci. 71 (1978) 731
22. C.E. Harvie y J.E. Weare, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 187
23. J. Rössler, Comunicación privada (1981)
24. W.H. Miller, J. Chem. Phys. 53 (1970) 1949
25. W.H. Miller, Adv. Chem. Phys. 25 (1974) 69
26. R.A. Marcus, Chem. Phys. Lett. 7 (1970) 525
27. R.A. Marcus, J. Chem. Phys. 59 (1973) 5135
28. J.D. Doll, Chem. Phys. 61 (1974) 954
29. J.D. Doll, Chem. Phys. 3 (1974) 257
30. R.I. Masel, R.P. Merrill y W.H. Miller, Phys. Rev. B 12
(1975) 5545
31. H. Massmann, M. Rivas y G. Urzúa, Comunicación privada
(1981)

32. R.J. Masel, R.P. Merrill y W.H. Miller, J. Chem. Phys. 65 (1976) 2690
33. F.O. Goodman, Surf. Sci. 19 (1970) 93
34. F.O. Goodman, J. Chem. Phys. 58 (1973) 5530
35. F.O. Goodman, Surf. Sci. 46 (1974) 118
36. J.B. Mason, Surf. Sci. 19 (1970) 67
37. A.C. Levi, U. Garibaldi, R. Spadacini y G.F. Tommei, Surf. Sci. 62 (1977) 487
38. M.V. Berry, J. Chem. A 8 (1975) 566
39. H. Chow, Surf. Sci. 62 (1977) 487
40. J. Rössler y G. Martínez, Comunicación personal (1981)
41. N. García, J. Ibañez, J. Solana y N. Cabrera, Solid State Com. 20 (1976) 1159
42. N. García, J. Ibañez, J. Solana y N. Cabrera, Surf. Sci. 60 (1976) 385
43. N. García, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 912
44. N. García, J. Chem. Phys. (1977)
45. N. García, Surf. Sci. 68 (1977), 399
46. J.H. Weare, J. Chem. Phys. 61 (1974) 2900
47. Curso de Física Teórica, Vol. 3, Mecánica Cuántica, L.D. Landau y E.M. Lifshitz. Editorial Reverté (1969)
48. IBM Application Program, System 360, Scientific Subroutine Package
49. H. Hoinkes, Rev. Modern Phys. V 52 N°4 (1980) 933