# Резонансные явления в рассеянии низкоэнергетических электронов на планарных кристаллических наноструктурах

© Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин

Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук, 426001 Ижевск, Россия

E-mail: wolf@otf.fti.udmurtia.su

#### (Поступила в Редакцию 21 ноября 2005 г.)

Рассмотрено многократное рассеяние низкоэнергетических электронов на наноструктуре из плоских кристаллических пленок. Показано, что при определенном соотношении между геометрическими и потенциальными параметрами системы возникают резонансные состояния рассеивающихся электронов, характеризующиеся резким относительным увеличением коэффициента прохождения электронов. При определенных значениях межпленочных расстояний резонансной структуры образуются узкие окна прозрачности, отвечающие почти полному прохождению электронного пучка. Предложен способ квантово-механического расчета параметров резонансной структуры.

Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН "Низкоразмерные квантовые наноструктуры".

PACS: 61.14.Hg, 61.46.-w, 03.65.Nk

Резонансное туннелирование электронов обычно связывают с явлениями в тонкопленочных гетероструктурах, получившими практическое применение при создании приборов квантовой электроники: резонанснотуннельных диодов и триодов, резонаторов и т.д. [1,2]. Суть эффекта состоит в том, что для состояний электронов образца с энергиями меньше высот поверхностных и интерфейсных барьеров при определенных условиях, зависящих от параметров гетероструктуры, возможно возникновение аномально высокой вероятности туннелирования электрона из квантовой ямы.

Резонансные явления имеют место и в рассеянии внешних электронных пучков на массивных кристаллах и тонких квантово-размерных пленках. Причины их возникновения весьма разнообразны: от существования квазистационарных состояний в окрестностях критических точек энергетических зон электронов объемных кристаллов [3–5] до влияния стационарных [6,7] и квазистационарных [8] состояний сплошного спектра, структуры зон связанных состояний квантово-размерных пленок [9] на амплитуду рассеяния электронов.

В настоящей работе рассмотрены условия возникновения и характер резонансного рассеяния скользящих низкоэнергетических электронов системой тонких кристаллических пленок.

#### 1. Постановка задачи. Основные уравнения

Прямой динамический расчет состояний рассеяния и квазистационарных состояний электронов сложных пленочных структур весьма непрост. Это связано не только со значительными вычислительными затратами, обусловленными большим числом атомов в элементарной ячейке такой структуры, но и с необходимостью выхода в комплексную плоскость энергий для учета конечных времен жизни резонансных состояний и с общими проблемами точного расчета возбужденных состояний [10]. Кроме того, в пленочных структурах существование резонансных состояний при заданных параметрах первичных электронов решающим образом зависит от заранее неизвестной "резонансной" геометрии: числа слоев, их толщин, межслоевых расстояний. Эти величины входят в динамический расчет как параметры. Проведение множества трудоемких расчетов для поиска набора их "резонансных" значений весьма нерационально. Желательно иметь способ приближенного определения резонансных значений структурных параметров, качественно проясняющий ситуацию. Эти значения при необходимости могут быть использованы в более прецизионном расчете. Такой способ должен быть достаточно реалистичным и учитывать существенные стороны процесса многократного рассеяния на кристаллической мишени. Использование слишком простых "одномерных" моделей приводит не только к существенным количественным расхождениям, но иногда [9,11] и к качественно ошибочным результатам.

Рассмотрим рассеяние электронов с энергией E и импульсом **р**  $(E = \mathbf{p}^2)^1$  на структуре плоских кристаллических пленок, расположенных перпендикулярно оси z. Считаем, что решетки пленок имеют соизмеримые периоды, так что вся структура может быть охарактеризована некоторой кристаллической решеткой с элементарной ячейкой  $\Omega$ .

Волновая функция рассеивающегося электрона удовлетворяет уравнению Липпмана-Швингера

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, E) = e^{i\left(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\nu}, \sqrt{E-(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\nu})^{2}}\right)\mathbf{r}} + \int_{\Omega} G_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)V(\mathbf{r}')\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}', E)d\mathbf{r}', \quad (1)$$

где  $\mathbf{k} = \mathbf{p}_{\parallel} - \mathbf{K}_{\nu}$  — приведенный двумерный квазиимпульс,  $\mathbf{p}_{\parallel}$  — параллельная поверхности системы состав-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Используется атомная система единиц с энергией в Ry.

ляющая вектора **p**, а  $\mathbf{K}_{\nu}$  — вектор обратной решетки пленочной структуры, приводящий  $\mathbf{p}_{\parallel}$  в двумерную зону Бриллюэна.

Функция Грина свободных электронов рассматриваемой структуры, отвечающая уходящим волнам, имеет вид [12,13]

$$G_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = \frac{1}{2iS} \sum_{\mu} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\mu})(\mathbf{u}-\mathbf{u}')} \frac{e^{i\sqrt{E-(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\mu})^2}|z-z'|}}{\sqrt{E-(\mathbf{k}+\mathbf{K}_{\mu})^2}},$$
(2)

где S — площадь сечения ячейки  $\Omega$  плоскостью  $z = \text{const}, \mathbf{u}(\mathbf{u}')$  — проекция вектора  $\mathbf{r}(\mathbf{r}')$  на поверхность системы пленок.

Для рассматриваемых в работе низких энергий падающих электронов, меньших порогов плазменных возбуждений, поглощение мало [14].<sup>2</sup> Поэтому оптический потенциал  $V(\mathbf{r})$  будем считать вещественным и в духе теории функционала электронной плотности равным эффективному кристаллическому потенциалу системы, включающему как электростатический, так и обменнокорреляционный вклад [10,15].

Если перпендикулярная поверхности системы составляющая импульса рассеивающихся электронов мала, так что  $k_z = \sqrt{E - \mathbf{k}^2} \ll |\sqrt{E - (\mathbf{k} + \mathbf{K}_{\mu})^2}|$ , что справедливо при малых энергиях и скользящем падении электрона, то, выделяя в функции Грина главный член, получим

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, E) = e^{i(\mathbf{k}, k_z)\mathbf{r}} + \frac{1}{2iS} \int_{\Omega} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{u}')} \frac{e^{ik_z|z-z'|}}{k_z} V(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}', E) d\mathbf{r}'.$$
(3)

Для простоты рассмотрим далее пленочную структуру, состоящую лишь из трех пленок. Обобщение на случай большего числа пленок выполняется непосредственно.

Расчеты электронных состояний изолированных пленок показывают, что при удалении от поверхности в вакуум эффективный потенциал быстро стремится к нулю. Обычно на расстоянии двух постоянных решетки<sup>3</sup> выполняется условие  $|V(\mathbf{r})| < 10^{-5}$  Ry. Поэтому во избежание усложнений, связанных с учетом дальней асимптотики потенциалов пленок, введем, как это часто делается, соответствующее обрезание пленочных потенциалов [16]. Будем считать что

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{3} V_j(\mathbf{r} - \mathbf{a}_j)\Theta_j(z).$$
(4)

Здесь  $V_j(\mathbf{r} - \mathbf{a}_j)$  — потенциал *j*-й пленки, "центрированный" в точке  $\mathbf{a}_i = (0, 0, a_j)$ ,

$$\Theta_j(z) = \begin{cases} 1, & |z - a_j| \le l_j, \\ 0, & |z - a_j| > l_j, \end{cases}$$
(5)

где  $l_j$  — параметры обрезания потенциала. Для рассматриваемого случая трехпленочной структуры  $a_1 = -a_-$ ,  $a_2 = 0$ ,  $a_3 = a_+$ , где  $a_-$  и  $a_+$  — расстояния от центральных плоскостей "нижней" и "верхней" пленок до центральной плоскости "средней" пленки, содержащей начало координат. Область ячейки  $\Omega$ , в которой потенциал *j*-й пленки отличен от нуля, обозначим  $\Omega_j$ .

Если  $k_z l_j \ll 1$ , что справедливо для скользящих пучков и тонких пленок, то при **r**, лежащем в области  $\Omega_j$ , получим

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, E) \approx \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) + \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{u}}}{2iSk_z} e^{-i\varepsilon_{j2}k_z a_j}$$
$$\times \sum_{j'=1}^{3} e^{i\varepsilon_{jj'}k_z a_{j'}} \int_{\Omega_{j'}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{u}'} V_{j'}(\mathbf{r}' - \mathbf{a}_{j'}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}', E) d\mathbf{r}'$$
$$\equiv \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) + A_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{u}), \quad j = 1, 2, 3, \quad (6)$$

$$\varepsilon_{jj'} = \begin{cases} 2 - j, & j = j', \\ \frac{j' - j}{|j' - j|}, & j \neq j'. \end{cases}$$
(7)

Тогда в любой точке ячейки Ω имеем

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, E) \approx e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{u}}}{2ik_{z}} \sum_{j=1}^{3} \int_{-l_{j}}^{l_{j}} e^{ik_{z}|z-z'|} V_{0}^{j}(z'-a_{j})[e^{ik_{z}z'}+A_{j}]dz', \quad (8)$$

где

$$V_0^j(z-a_j) = \frac{1}{S} \int_{S} V_j(\mathbf{r} - \mathbf{a}_j) d\mathbf{u}$$
 (9)

Фурье-компонента эффективного потенциала *j*-й пленки, отвечающая  $\mathbf{K}_{\mu} = 0$ . В частности, если **r** лежит в области  $\Omega_j$ , то, согласно (6) и (8), в прежнем приближении получим систему линейных относительно  $A_j$ уравнений

$$\sum_{j'=1}^{3} \left( \frac{\delta_{jj'}}{\omega_j} - 1 \right) \omega_{j'} e^{i\varepsilon_{jj'}k_z a_{j'}} A_{j'}$$
$$= \sum_{j'=1}^{3} \omega_{j'} e^{ik_z a_{j'}(\varepsilon_{jj'} + 1)}, \quad j = 1, 2, 3.$$
(10)

В этих уравнениях  $\omega_j = \langle V_j \rangle / (2ik_z)$ , где

$$\frac{1}{2l_j} \langle V_j \rangle = \frac{1}{2l_j} \int_{-l_j}^{l_j} V_0^j (z - a_j) dz -$$
(11)

среднее значение эффективного потенциала *j*-й пленки.

 $<sup>^2</sup>$ Для большинства кристаллов это означает, что энергия электрона меньше порога появления незеркально отраженных лучей и вектор  $\mathbf{K}_{\nu}$  в уравнении (1) равен нулю.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Электронная плотность и электростатический потенциал стремятся к нулю значительно быстрее. Более медленное изменение эффективного потенциала связано с обменно-корреляционным вкладом.

Согласно (3), при  $z \rightarrow -\infty$ 

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, E) \to e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{u}}}{2iSk_z}e^{-ik_z z}$$
$$\times \int_{\Omega} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}', E)d\mathbf{r}' \equiv e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + Re^{i(\mathbf{k}_z - k_z)\mathbf{r}}.$$
 (12)

Привлекая уравнение (8), с учетом связей между коэффициентами  $A_j$ , даваемых системой уравнений (10), для амплитуды рассеяния "назад" получим

$$R = e^{-ik_z a} A_1. \tag{13}$$

Коэффициент отражения электронов равен  $K_R = |R|^2 = |A_1|^2$ . Аналогично, рассматривая асимптотику состояний рассеяния при  $z \to +\infty$ , для амплитуды рассеяния "вперед", определяющей коэффициент прохождения  $K_T = |1 + T|^2$ , получим

$$T = e^{-ik_z a_+} A_3. (14)$$

Резонансные состояния отвечают решениям однородного уравнения Липпмана-Швингера с комплексными энергиями, лежащими в нижней части комплексной плоскости (ImE < 0) [16]. Соответствующие комплексные значения  $k_z = \sqrt{E - \mathbf{k}^2} = k_3 - i\gamma$  ( $\gamma > 0$ ) являются корнями детерминанта системы уравнений (10). После несложных преобразований уравнение для определения энергий и времен жизни резонансных состояний можно записать в виде

$$\det \left| \left[ \left( 1 - \frac{1}{\omega_j} \right) e^{i\varepsilon_{jj'}k_z a_j} - 1 \right] \delta_{jj'} + 1 \right| = 0, \quad j, j' = 1, 2, 3.$$
(15)

Уже в случае трех пленок уравнение (15) описывает множество ситуаций, различающихся как геометрией, так и типом пленок, образующих рассматриваемую структуру. Для выяснения существа получаемых результатов рассмотрим наиболее простой случай трех одина-ковых пленок ( $\omega = \omega_1 = \omega_2 = \omega_3$ ), крайние из которых расположены на расстояниях  $a_-$  и  $a_+$  от центральной пленки.

### 2. Резонансное рассеяние на структуре из трех одинаковых пленок

В случае одинаковых пленок уравнение (15) можно записать в виде

$$e^{-2ik_z a_+} = \xi^2 \frac{e^{-2ik_z a_-} - 2\xi + 1}{e^{-2ik_z a_+} - \xi^2},$$
 (16)

где  $\xi = \omega/(\omega - 1)$ . Представляя правую часть равенства (16) в тригонометрической форме  $U \exp(i\varphi)$  и



Рис. 1. Общий характер зависимости ширины резонанса от рассеяния до нижней пленки.

выделяя в  $k_z$  вещественную и мнимую части, получим систему уравнений

$$\begin{cases} a_{+} = -\ln U(a_{-}, k_{3}, \gamma)/2\gamma, \\ k_{3} \ln U(a_{-}, k_{3}, \gamma)/\gamma \\ -\varphi(a_{-}, k_{3}, \gamma) = 2n\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \end{cases}$$
(17)

которая позволяет найти зависимость  $a_+$  и  $\gamma$  от  $a_-$  и  $k_3$ . В дальнейших вычислениях положим  $k_3 = 0.01$  а.u., что согласуется с условием скользящего падения электронов, а  $\langle V \rangle = -10$  а.u., что по порядку величины отвечает монослою меди с параметром обрезания потенциала около двух постоянных решетки.

2.1. В ремя жизни резонансных состояний. Численное решение второго уравнения системы (17) для заданных  $k_3$  и  $\langle V \rangle$  и различных  $a_-$  дает зависимость  $\gamma$  от этого геометрического параметра.<sup>4</sup> Характер получаемых решений при  $\gamma$ , лежащих в интервале от  $10^{-7}$  до  $3.5 \cdot 10^{-6}$  а.u., представлен на рис. 1, при этом зависимости имеют вид сужающихся с ростом *n* петель.

Из уравнения (16) следует, что  $\gamma = 0$  не является его корнем ни при каких значениях  $a_+$  и  $a_-$ . Кривые зависимости  $\gamma$  от  $a_-$  при малых  $\gamma$ , приведенные на рис. 2, имеют приближенную точку ветвления при  $a_- = 314.360$  а.u. = 16.6296 nm. В ее окрестности кривые, отвечающие  $n \ge 0$ , возрастают, а кривые, отвечающие n < 0, убывают, стремясь к отличному от нуля минимальному значению (рис. 3).

2.2. Электронное рассеяние на пленочной структуре резонансной геометрии. Резонансные значения расстояний  $a_+$  до верхней пленки, соответствующие найденным  $\gamma(a_-)$ , определяются первым уравнением системы (17). Расчет показывает, что n > 0

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Время жизни резонансных состояний  $\tau = 1/|\text{Im}E| = 1/(2k_3\gamma)$ .



Рис. 2. Зависимость ширины резонанса у от расстояния до нижней пленки при малых у (окрестность точки ветвления).



**Рис. 3.** Зависимость ширины резонанса  $\gamma$  от расстояния до нижней пленки.

отвечают не имеющие физического смысла отрицательные значения  $a_+$ ; n = 0 отвечает  $a_+ \approx 0$ , что также не согласуется с постановкой задачи. При n < 0 во всем интервале изменений  $a_-$  с хорошей точностью  $a_+ \approx -n\pi/k_3$  (a.u.). Наименьшее резонансное значение, получающееся при n = -1, составляет  $a_+ \approx 16.619$  nm. Далее остановимся на этом случае.

Для используемых значений  $k_3$  и  $\langle V \rangle$  имеем  $1/\omega = -2i \cdot 10^{-3}$ , и, согласно (10), для большинства значений  $a_+$  и  $a_-$  коэффициент электронного прохождения  $K_T = 1 - K_R = 1 - |A_1|^2$  мал. Резонансные значения  $a_+$  и  $a_-$  выделены тем, что для них при данном импульсе налетающих электронов прохождение максимально. Малое изменение  $k_z$  ведет к резкому уменьшению прозрачности структуры. При отклонении  $k_z$  от  $k_3$  на  $10^{-7}$  а.u. коэффициент прохождения уменьшается более чем в  $10^3$  раз, хотя его абсолютное изменение, как правило, очень мало (рис. 4).

Однако существуют аномальные ситуации. При некоторых значениях расстояний  $a_+$  и  $a_-$  имеет место  $A_1 = 0$  из-за обращения в нуль детерминанта числителя в выражении, определяющем это решение системы уравнений (10) по правилу Крамера. Вычисления показывают, что при  $1/\omega = -2i \cdot 10^{-3}$  этому условию удовлетворяют две пары значений  $k_z a_+$  и  $k_z a_-$ 

$$\cos(2k_z a_-^{(1)}) = \cos(2k_z a_+^{(1)}) = 1 - 2 \cdot 10^{-6}, \qquad (18)$$

$$\cos(2k_z a_-^{(2)}) = \cos(2k_z a_+^{(2)}) = 1 - 18 \cdot 10^{-6}.$$
 (19)

При  $k_z = k_3$  для  $a_-$ , лежащего вблизи точки сгущения функции  $\gamma(a_-)$ , и  $a_+$ , наиболее близкого



**Рис. 4.** Зависимость коэффициента прохождения различных резонансных структур от нормальной составляющей импульса налетающих электронов. Для  $a_{-} = 314.25$  а.u. — приведенные значения  $K_T$  следует умножить на  $10^5$ , т. е. при  $k_z = k_3 K_T = 1$ .



Рис. 5. Зависимость коэффициента отражения от расстояния до нижней пленки.



**Рис. 6.** Зависимость коэффициента прохождения идеальной резонансной структуры от малых изменений нормальной составляющей импульса налетающих электронов.

к наименышему резонансному значению, это дает  $a_{-}^{(1)} = a_{+}^{(1)} = 16.624$  nm и  $a_{-}^{(2)} = a_{+}^{(2)} = 16.635$  nm. Эволюция  $K_R$  в области, содержащей  $a_{-}^{(1,2)}$ , приведена на рис. 5. В окрестностях  $a_{-} = a_{-}^{(1)}$  и  $a_{-} = a_{-}^{(2)}$  при соответствующих им резонансных значениях  $a_{+}$  возникают узкие окна прозрачности пленочной наноструктуры. Зависимость коэффициента прохождения от вариации  $k_z$ имеет ярко выраженный резонансный характер (рис. 6). При отклонении  $k_z$  от  $k_3$  всего лишь на  $10^{-7}$  а.u. полное прохождение сменяется практически полным отражением. Таким образом, данная пленочная наноструктура является чрезвычайно узкополосным фильтром, позволяющим выделить электроны с заданной величиной нормальной составляющей волнового вектора.

2.3. Устойчивость резонансного прохождения. Из приведенных выше результатов следует, что для геометрических параметров системы, в точности отвечающих полюсам амплитуды рассеяния в комплексной *k*-плоскости, электронное отражение имеет сильно выраженный резонансный характер. В реальной системе расстояния  $a_+$  и  $a_-$  могут несколько отличаться от их резонансных значений. Рассмотрим влияние небольших отклонений от идеальной резонансной геометрии на коэффициент прохождения электронов. На рис. 7 представлены результаты расчета  $K_T$  для электронов с разными  $k_z$  на пленочных наноструктурах с расстояния-



**Рис. 7.** Зависимость коэффициента прохождения от импульса налетающих электронов при малых отклонениях расстояния до нижней пленки от резонансного значения.

ми а\_, лежащими в окрестности окна прозрачности:

$$a_- = a_-^{(1)} \pm m \cdot \delta a,$$

где  $a_{-}^{(1)} = 314.259$  a.u. = 16.624 nm,  $\delta a = 5 \cdot 10^{-2}$  a.u., m = 0, 1, 2, ..., 30. Соответствующее  $a_{-}^{(1)}$  резонансное значение  $a_+$  в процессе расчета не менялось.<sup>5</sup> Максимумы  $K_T \approx 1$ , появляющиеся при  $k_z = k_z^{(1)} = k_3$  и  $k_z = k_z^{(2)} = k_3 + 6.4 \cdot 10^{-6}$ а.u., отвечают идеальной резонансной геометрии (m = 0). Величины  $k_z^{(1)}$  и  $k_z^{(2)}$  очень хорошо согласуются с условиями просветления (18), (19) при фиксированной геометрии пленочной структуры. С увеличением  $|a_{-} - a_{-}^{(1)}|$  происходит удаление  $k_z$ , отвечающих максимальному прохождению электронов, от  $k_z^{(1)}$  и  $k_z^{(2)}$ , сопровождающееся уменьшением  $K_T$ (рис. 7). Точно такая же картина имеет место при изменении расстояния А<sub>+</sub> вблизи окна прозрачности резонансной структуры. Таким образом, при небольших отклонениях от идеальной резонансной геометрии прохождение электронов сохраняет резонансный характер, но происходит существенное расширение полосы пропускания.

Проведенное рассмотрение является, по существу, описанием интерференции электронных волн с точки зрения резонансных состояний многократного рассеяния на кристаллической структуре. Механизм возникновения резонансной прозрачности во многом схож с известным явлением просветления оптических систем. В случае электронов предложенный квантово-механический подход позволяет рассчитать величину эффекта в конкретной пленочной структуре, используя значения  $\langle V \rangle_i$ , полученные на основе *ab initio* расчетов электронных состояний изолированных пленок. Очень резкий резонанс электронного прохождения в рассмотренном нами случае трех одинаковых пленок обусловлен использованным в расчете значением "среднего" потенциала  $\langle V \rangle$ . В реальных системах, особенно когда составляющие их пленки имеют сложный состав или сами являются многослойными гетероструктурами,  $\langle V \rangle_i$  могут сильно отличаться от использованного нами значения. Естественно ожидать, что увеличение числа пленок и рассмотрение структур с разными  $\langle V \rangle_i$  привнесут свои особенности в резонансную прозрачность системы.

## Список литературы

- [1] Л.В. Иогансен. УФН 86, 175 (1965).
- [2] А.С. Тагер. Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ 9 (403), 21 (1987).
- [3] Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин, Д.В. Федоров, В.Н. Строков. ФТТ 41, 2105 (1999).
- [4] Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин. ФТТ 40, 2003 (1998).
- [5] Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин. Поверхность 3, 16 (2000).

<sup>5</sup> Для данных значений  $k_3$ ,  $\langle V \rangle$  и  $a_{-}^{(1)}$  имеем  $a_+/\pi = 100.03197$  a.u., а  $\gamma(a_{-}^{(1)}) = 3.1831106 \cdot 10^{-9}$  a.u.

- [6] Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин. ФТТ 47, 1015 (2005).
- [7] Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин, Л.А. Рубцова. Поверхность 10, 81 (1991).
- [8] Г.В. Вольф, Ю.П. Чубурин, А.Е. Павлов, Л.А. Рубцова. Поверхность 12, 24 (1992).
- [9] Yu.P. Chuburin, G.V. Wolf. J. Phys.: Cond. Matter 8, 631 (1996).
- [10] L. Fritsche. Phys. Rev. B 33, 3976 (1986).
- [11] A.A. Grinberg, S. Luryi. Phys. Rev. B 39, 7466 (1989).
- [12] N. Kar, P. Soven. Phys. Rev. B 11, 3761 (1975).
- [13] W. Kohn. Phys. Rev. B 11, 3756 (1975).
- [14] V.N. Strocov. Int. J. Mod. Phys. 9, 1755 (1995).
- [15] J. Pendry. Low energy electron diffraction. Academic, N.Y. (1974). 407 p.
- [16] Дж. Тейлор. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. Мир, М. (1975). 566 с.