

УДК 539.213

## ВОЗБУЖДЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ И ПОВЕРХНОСТНАЯ ДИФФУЗИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА НА ВОЛЬФРАМЕ

*Браун О. М., Пашицкий Э. А.*

Эксперименты [1], проведенные в автоэлектронном микроскопе, показали, что при температуре  $<130$  К наблюдается не зависящая от температуры подложки поверхностная (двумерная) диффузия атомов водорода, адсорбированного на грани (110) вольфрама (система H-W (110)). На основании этого в работе [1] сделан вывод о наблюдении туннельной (подбарьерной) диффузии атомов водорода. Однако для теоретического обоснования этого вывода пришлось предположить, что ширина потенциальных барьеров между центрами адсорбции аномально мала ( $l \approx 0,5 a_0$ , где  $a_0$  — боровский радиус). Из экспериментальных данных [1, 2] можно оценить высоту потенциального барьера  $\epsilon_B$  ( $\epsilon_B - 1/\omega_0^{(II)} \approx 0,20 - 0,35$  эВ), а по минимальной частоте параллельных поверхности (продольных) колебаний адатомов  $\omega_0^{(II)} \approx 80$  мэВ [3] — глубину и ширину параболической потенциальной ямы и тем самым восстановить качественный вид потенциального рельефа и систему колебательных уровней (без учета ангармонизма) для адатомов H на W (рис. 1). Отсюда следует, что даже для первого возбужденного уровня ( $n=1$ ) ширина барьера  $l_1 \approx 3,8 a_0$ , что полностью исключает возможность сколько-нибудь заметной туннельной диффузии. На отсутствие подбарьерной диффузии указывают также результаты экспериментов работы [2]. Остается открытым вопрос об аномально большой величине температурно независящего в области  $T < 130$  К коэффициента диффузии, измеренного в работе [1], а также о причине высокой скорости разупорядочения субмонослоистых пленок водорода на вольфраме при облучении медленными электронами, наблюдавшейся в работе [2].

В настоящей работе предложено качественное объяснение этих двух эффектов на основе предположения о возбуждении продольных квазилокальных колебаний адатомов автоэмиссионными электронами (в работе [1]) и пучком медленных электронов (в экспериментах работы [2]) с последующей миграцией колебательных возбуждений и надбарьерной диффузией адатомов H на W.

**Механизмы возбуждения колебаний и диффузии адатомов.** Сравнительно большие времена жизни локальных колебаний адатомов в системе H-W ( $\tau^{(II)} \gg \tau^{(I)} \gg 10^{-11}$  с [4]) приводят к накоплению колебательных возбуждений в пленке водорода при различных внешних возбуждениях, не связанных с нагревом подложки (инфракрасное облучение, электронные пучки), а также непосредственно в процессе адсорбции.

При нагреве подложки до некоторой температуры  $T$  после установления термодинамического равновесия доля адатомов, находящихся на  $n$ -м колебательном уровне, равна

$$v_n(T) = \exp(-n\omega_0/T). \quad (1)$$

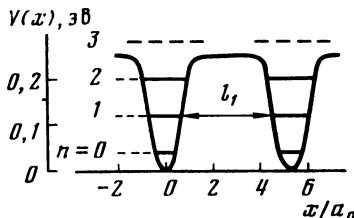


Рис. 1. Потенциальный рельеф и колебательные уровни для адатома H на W(110) при  $\epsilon_B = 0,25$  эВ и  $\omega_0^{(II)} = 0,08$  эВ

При облучении поверхности инфракрасным (ИК) светом вероятность возбуждения (в единицу времени) на первый колебательный уровень равна [5]

$$P_1 = 16\pi^2 c^{-1} (e^* r_0)^2 I(\omega_0) \sin^2 \alpha,$$

где  $c$  — скорость света;  $e^*$  — динамический заряд атома водорода, равный 0,04 [6];  $r_0 = (2m_A \omega_0)^{-1/2}$  — амплитуда колебаний атома массы  $m_A$  с частотой  $\omega_0$ ;  $I(\omega)$  — интенсивность ИК-света с частотой  $\omega$ ;  $\alpha$  — угол падения света ( $\alpha \leq 85^\circ$ ). Разумеется, таким способом можно возбудить только перпендикулярные к поверхности (поперечные) колебания атомов H на W, для которых  $e^* \neq 0$  [6]. При конечной степени покрытия подложки атомами ( $\theta \neq 0$ ), когда существенна дисперсия колебаний  $\omega_0(k)$ , обусловленная непрямым взаимодействием между атомами [4], ИК-свет возбуждает только длинноволновую моду с  $k \approx 0$ . В связи с этим особый интерес представляет механизм возбуждения локальных колебаний атомов электронным потоком либо при автоэлектронной эмиссии [1], либо при облучении поверхности медленными электронами [2], когда возбуждаются все типы колебаний [3].

Пусть электрон падает перпендикулярно поверхности (вдоль оси OZ) на расстоянии  $\rho$  от атома с некоторой скоростью <sup>1</sup>  $v = [2(\epsilon_0 + \varphi)]^{1/2}$ , где  $\epsilon_0$  — начальная кинетическая энергия электрона,  $\varphi$  — ускоряющий потенциал сил изображения. С учетом сил изображения движущийся электрон создает в точке расположения атома зависящий от времени  $t$  потенциал

$$V(t) = -2z(z^2 + \rho^2)^{-1/2}; \quad z = vt.$$

Энергия и сила взаимодействия пролетающего электрона с дипольным моментом атома  $p$  и динамическим зарядом  $e^* = \partial p / \partial z$  равны соответственно

$$\epsilon_{int} = V(t)p; \quad F(t) = -\partial \epsilon_{int} / \partial z = -e^* V(t).$$

Сечение возбуждения квантово-механической системы (атома) на  $n$ -й колебательный уровень равно [7]

$$\sigma_n = \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\mu^n(\rho)}{n!} e^{-\mu(\rho)} 2\pi\rho d\rho;$$

$$\mu(\rho) = \left| r_0 \int_{-\infty}^0 e^{i\omega_0 t} F(t) dt \right|^2, \quad (2)$$

где  $r_{min}$  — минимальное расстояние, на котором еще действует дипольный механизм возбуждения поперечных колебаний ( $r_{min} \approx a_0$ ). Вычисление сечения  $\sigma_1$  с учетом возможного отражения электронов с коэффициентом  $R < 1$  приводит к следующему выражению [8]:

$$\sigma_1^{(1)} \approx (1+3R) \frac{4\pi(e^*)^2}{m_A \omega_0 v^2} \ln \left( \frac{v}{\omega_0 r_{min}} \right). \quad (3)$$

Отметим, что строгое квантово-механическое рассмотрение этой задачи [9] и модельное описание электрона, движущегося по классической траектории [10], приводят к одинаковым результатам для хаотического потока электронов. Оценки по формуле (3) при  $\omega_0^{(1)} = 130$  мэВ и  $(\epsilon_0 + \varphi) \approx 10$  эВ приводят к величине  $\sigma_1^{(1)} \approx 2 \cdot 10^{-2} a_0^2$ .

Данные экспериментов работы [3] позволяют независимо оценить сечение возбуждения локальных колебаний атомов в системе H — W(100). Измеренное отношение тока упругоотраженного пучка электронов  $j_{el}$  к неупругоотраженному с потерей энергии на возбуждение поперечных ко-

<sup>1</sup> Здесь и далее использована атомная система единиц:  $\hbar = m_e = e^2 = 1$ .

лебаний  $j_{\perp}$  составляет  $b=j_{el}/j_{\perp} \leq 10$  во всех направлениях, кроме брэгговских, для которых  $b \leq 150$  в телесном угле  $\Delta\Omega \leq 2^\circ$ . Поскольку интенсивность упругоотраженного пучка равна  $j_{el}=Rj$ , где  $j$  – ток падающего пучка, а коэффициент отражения при  $\varepsilon_0 \sim 10$  эВ составляет  $R \approx 0,2-0,3$  [11], то экспериментальное значение сечения возбуждения адатома на первый уровень  $\sigma_1^{(\perp)} = \sigma_0 R/b$  ( $\sigma_0 = a^2/2$  – площадь элементарной ячейки адсорбированной пленки при покрытии  $\theta=2$ ;  $a=3,16$  Å – постоянная решетки вольфрама) равно  $\sigma_1^{exp} \approx (0,3-0,5)a_0^2$  для поперечных колебаний и  $\sigma_1^{(II)} \approx (0,1-0,3)\sigma_1^{exp}$  для продольных [3].

Сравнение экспериментального и теоретического значений  $\sigma_1^{(\perp)}$  убедительно показывает, что из-за малости динамического заряда адатома H на W возбуждение поперечных (а тем более продольных) локальных колебаний в системе H–W обусловлено не дальнодействующим дипольным механизмом, а короткодействующими квантово-механическими силами на расстояниях  $r \leq r_{min}$ . Этот вывод согласуется с расчетами сечений возбуждения колебаний молекул с фиксированной ориентацией [12]. Дипольный механизм приводит лишь к появлению резких максимумов в брэгговских направлениях, вклад которых в полное сечение возбуждения мал ( $\Delta\Omega/4\pi < 10^{-2}$ ).

Расчет сечения возбуждения колебания за счет близкодействующего механизма взаимодействия электрона с адатомом представляет весьма сложную самостоятельную задачу, так как требует полного микроскопического описания системы [13]. Однако для приближенных оценок можно положить  $\mu(\rho) = \bar{\mu} = const$  при  $\rho \leq r_{min}$  и  $\mu(\rho) = 0$  при  $\rho > r_{min}$ , а затем, положая  $\bar{\mu} \ll 1$ , согласно выражению (2), вычислить сечение

$$\sigma_n \approx \pi r_{min}^3 \bar{\mu}^n / n! \quad (4)$$

Используя приведенные выше средние экспериментальные значения  $\sigma_1^{(\perp)} \approx 0,4a_0^2$  и  $\sigma_1^{(II)} \approx 0,08a_0^2$ , находим  $\bar{\mu}_{\perp} \approx 0,13$  и  $\bar{\mu}_{||} \approx 0,025$ , откуда с учетом выражения (4) можно получить оценки сечения возбуждения на второй, третий и т. д. колебательные уровни в системе H–W:

$$\begin{aligned} \sigma_2^{(\perp)} &\approx 3 \cdot 10^{-2} a_0^2; \quad \sigma_2^{(II)} \approx 10^{-3} a_0^2; \\ \sigma_3^{(\perp)} &\approx 10^{-3} a_0^2; \quad \sigma_3^{(II)} \approx 9 \cdot 10^{-6} a_0^2. \end{aligned} \quad (5)$$

При облучении поверхности постоянным потоком медленных электронов  $j$  доля адатомов, находящихся в  $n$ -м возбужденном состоянии, составляет  $v_n = j \sigma_n \tau$ , где  $\tau$  – время жизни колебательного возбуждения. Такое распределение можно описать, вводя эффективную температуру  $T_n$  (ср. с формулой (1)):

$$v_n = \exp(-n\omega_0/T_n), \quad (6)$$

откуда следует определение величины

$$T_n = -n\omega_0 / \ln(j\sigma_n \tau). \quad (7)$$

Зависимости  $T_n$  от  $j$  для разных уровней локальных колебаний, полученные с учетом найденных выше значений  $\sigma_n^{(II)}$  при  $\tau = \tau^{(\perp)} = 10^{-11}$  с [4], представлены на рис. 2. Поскольку время жизни продольных колебаний

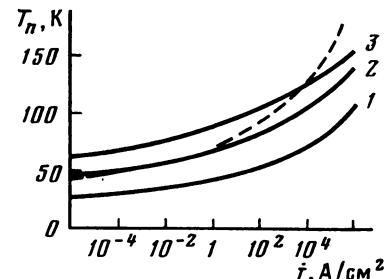


Рис. 2. Зависимости  $T_n(j) = -n\omega_0 / \ln(j\sigma_n^{(II)} \tau^{(\perp)})$  для  $n=1$ , 2 и 3. Пунктиром представлена зависимость  $T_1^{(\perp)}(j) = -\omega_0 / \ln(j\sigma_1^{exp} \tau^{(\perp)})$

больше, чем поперечных ( $\tau^{(II)} \gg \tau^{(\perp)}$ ) [4], то эти зависимости дают минимальную оценку величин  $T_n^{(II)}$  ( $T_n^{(II)} > T_n$ ). Как видно, в условиях экспериментов по дифракции медленных электронов (ток  $\sim 1$  мА, диаметр электронного пучка  $\sim 1$  мм,  $j \sim 10^{-4}$  А/см<sup>2</sup>), а тем более при автоэлектронной эмиссии (ток  $\sim 1$  мА, радиус острия  $\sim 1000$  Å,  $j \sim 10^4$  А/см<sup>2</sup>) «эффективная температура» колебаний может быть достаточно высокой ( $T_n > > 60 - 120$  К), причем наблюдается инверсная населенность высоковозбужденных состояний ( $T_{n+1} > T_n$ ). Это должно приводить к повышению скорости диффузии адатомов Н по поверхности W и к отсутствию температурной зависимости коэффициента диффузии при  $T < T_n$ .

Оценим скорость квантовой (туннельной) и классической (надбарьерной) диффузии адатомов в условиях неравновесной населенности колебательных уровней, соответствующих продольным колебаниям адатомов в потенциальных ямах рельефа подложки  $V(x) = \frac{1}{2}m_A(\omega_0^{(II)})^2 x^2$  с энергией  $\epsilon_n = (n + \frac{1}{2})\omega_0^{(II)} < \epsilon_B$  ( $\epsilon_B$  — высота потенциального рельефа) (рис. 1). Характерное время перескока адатома в соседнюю яму определяется квантовым процессом туннелирования сквозь барьер:

$$\tau_{\text{tun}}^{(n)} \simeq \frac{1}{\omega_0^{(II)}} \exp \{2l_n[2m_A(\epsilon_B - \epsilon_n)]^{1/2}\}, \quad (8)$$

где  $l_n$  — ширина барьера для  $n$ -го уровня. При этом коэффициент квантовой диффузии адатомов можно оценить по формуле

$$D_{\text{tun}} = \sum_n D_{\text{tun}}^{(n)} \simeq \sum_{\epsilon_n < \epsilon_B} v_n p a^2 / \tau_{\text{tun}}^{(n)}, \quad (9)$$

где  $v_n = \exp[-n\omega_0^{(II)} / \max(T, T_n)]$ , а  $p$  — статистический фактор, равный 1 или 0 в зависимости от того, свободен или занят адатомом соседний адсорбционный центр. Если же энергия возбужденных продольных колебаний  $\epsilon \geq \epsilon_B$ , т. е. адатом находится на квазилокальном уровне в области непрерывного спектра, то время перескока адатома на соседний центр равно по порядку величины  $\tau_d \sim 1/(\omega_0^{(II)})$ , а коэффициент надбарьерной диффузии равен

$$D \sim v_n' p a^2 / \tau_d \sim v_n' p a^2 \omega_0^{(II)}, \quad (10)$$

где  $v_n' = \exp[-(\epsilon_B - \omega_0^{(II)} / 2) / \max(T, T_n)]$  и  $n = 1 + [(\epsilon_B - \omega_0^{(II)} / 2) / \omega_0^{(II)}]$ .

Интересно отметить, что ввиду большого времени жизни продольных колебаний  $\tau^{(II)} \omega_0^{(II)} \gg 1$  [4] адатом в процессе адсорбции успеет продиффундировать на расстояние

$$l \sim (D \tau^{(II)})^{1/2} \sim a (\tau^{(II)} \omega_0^{(II)})^{1/2} \gg a. \quad (11)$$

Для потенциального рельефа, изображенного на рис. 1 ( $\epsilon_B = 0,25$  эВ,  $\omega_0^{(II)} = 80$  мэВ, расстояние между ближайшими адсорбционными центрами на грани (110) вольфрама равно  $a\sqrt{3}/2 = 2,74$  Å), из выражений (8) — (10) следует, что квантовая диффузия будет превалировать над классической при  $\max(T, T_n) < 50$  К, при этом  $D_{\text{tun}}^{(0)} > D_{\text{tun}}^{(1)} > D_{\text{tun}}^{(2)}$  и  $\tau_{\text{tun}}^{(0)} \omega_0^{(II)} \simeq 10^7$ . Однако подбарьерная диффузия в этом случае слишком мала и не должна наблюдаться в эксперименте [1], что согласуется с результатами работы [2]. Что же касается экспериментов работы [1], то здесь скорее всего происходит эффективный неравновесный «разогрев» адсорбированной пленки автоэмиссионным током электронов  $j \simeq 10^4$  А/см<sup>2</sup> до «эффективной температуры»  $T_n > T$  (рис. 2) с инверсной населенностью колебательного квази-

уровня с  $n=3$  и  $\varepsilon_s \geq \varepsilon_b$  (рис. 1), что и приводит к повышенной и не зависящей от температуры подложки надбарьерной диффузии с коэффициентом (10).

**Разупорядочение субмонослоиной пленки водорода под действием потока медленных электронов.** Продольные колебания атомов должны играть важную роль в процессе разупорядочения пленок H и W, особенно под действием внешнего облучения.

В упорядоченных структурах наряду с рассмотренной выше аномальной диффузией атомов H с характерным временем  $\tau_d \sim 1/\omega_0^{(II)}$  через инверсно заселенные надбарьерные возбужденные состояния с энергией  $\varepsilon \geq \varepsilon_b$  происходит миграция колебательных возбуждений с одного атома на другой за время  $\tau_d^* \sim (\Delta\omega_d^{(II)})^{-1}$  благодаря дисперсии продольных колебаний, возникающей за счет непрямого взаимодействия между атомами через электронные состояния подложки [4]. Если расстояние между атомами  $r \geq 2a$ , то  $\Delta\omega_d^{(II)} \ll \omega_0^{(II)}$  и  $\tau_d \ll \tau_d^* \ll \tau^{(II)}$ . Это значит, что за время  $\tau^{(II)}$  возбуждение успеет побывать на большом числе атомов и практически каждый возбужденный атом успеет сместиться из своего положения в соседний (свободный) адсорбционный центр, образовав дефект в упорядоченной структуре. Но даже если  $\Delta\omega_d^{(II)} \sim \omega_0^{(II)}$  и  $\tau_d^* \ll \tau_d$ , то ближайшее по пленке колебательное возбуждение за время релаксации  $\tau^{(II)} \gg \tau_d$  также успеет создать большое число дефектов в пленке. Отсюда следует, что выражение для эффективного сечения процесса разупорядочения субмонослоиной пленки водорода пучком медленных электронов<sup>2</sup> должно иметь вид (см. выражения (4) и (5))

$$\sigma_{\text{eff}} \approx \sigma_n^{(II)} \frac{\tau^{(II)}}{\max(\tau_d, \tau_d^*)} \gg \sigma_n^{(II)}. \quad (12)$$

Для обоснования этого качественного вывода рассмотрим подробнее кинетику начального этапа разупорядочения пленки водорода со структурой, например,  $p(2 \times 1)$ . Будем обозначать символом  $S$  атомы, находящиеся на правильных местах (их концентрация  $N_s$ ), символом  $D$  – атомы, находящиеся на неправильных местах (концентрация таких дефектов  $N_D$ ), символом  $X$  – свободный адсорбционный центр, а знаком «\*» – возбужденное состояние атома ( $S^*$  или  $D^*$ ) с энергией  $\varepsilon_n \geq \varepsilon_b$ , в котором возможен перескок атома на свободное место за время  $\tau_d$ . Рассмотрим следующие процессы: а) возбуждение атома  $S \rightarrow S^*$  (или  $D \rightarrow D^*$ ) под действием потока медленных электронов с плотностью  $j$ , которое характеризуется вероятностью  $P = j\sigma_n^{(II)}$  в единицу времени; б) спонтанную релаксацию возбуждения  $S^* \rightarrow S$  (или  $D^* \rightarrow D$ ) за время жизни  $\tau$ ; в) передачу возбуждения от дефектного атома правильному  $SD^* \rightarrow S'D$  за время  $\tau_d$ ; г) диффузию возбужденного атома  $S^*X \rightarrow X^*$  за время  $\tau_d$ .

Отметим, что кроме процесса б) возможен также вынужденный процесс релаксации с вероятностью  $P$ , однако им можно пренебречь, если  $P\tau \ll 1$ . На начальном этапе разупорядочения можно не учитывать также процессы, обратные процессам в) и г), поскольку  $N_D \ll N_s$ . Кинетические уравнения с учетом процессов а) – г) имеют вид

$$\dot{N}_s^* = +PN_s - N_s^*/\tau + N_D^*/\tau_d - N_s^*/\tau_d; \quad (13)$$

$$\dot{N}_D^* = +PN_D - N_D^*/\tau - N_D^*/\tau_d + N_s^*/\tau_d; \quad (14)$$

$$\dot{N}_D = -PN_D + N_D^*/\tau + N_D^*/\tau_d. \quad (15)$$

Систему уравнений (13)–(15) нужно дополнить условием сохранения

<sup>2</sup> Аналогичную роль могут играть и электроны автоэмиссии.

полного числа адатомов (процессом десорбции пренебрегаем):

$$N_A = N_s + N_{s^*} + N_D + N_{D^*} = \text{const}. \quad (16)$$

Для определения скорости образования дефектов необходимо вычислить величину

$$(N_D + N_{D^*}) = N_{s^*}/\tau_d = P_{\text{eff}} N_A, \quad (17)$$

где  $P_{\text{eff}} = j\sigma_{\text{eff}}$ . В дальнейшем нас будут интересовать времена  $t \gg \tau^{(1)} > 10^{-11}$  с, но  $t \ll P^{-1}$ . Так, например, в условиях экспериментов работы [2] использован электронный пучок диаметром  $\sim 3$  мм с током  $i \sim 0,5$  мА, т. е. с плотностью тока  $j \simeq 10^{-5}$  А/см<sup>2</sup>. Для процесса возбуждения адатома на третий колебательный уровень ( $n=3$ ) с сечением  $\sigma_3^{(1)} \simeq 10^{-5}$  а<sub>0</sub><sup>2</sup> величина  $P^{-1} \gtrsim 10^8$  с. Учитывая, что на начальном этапе разупорядочения  $N_s \simeq N_A \gg N_D$ , а также принимая во внимание условие

$$\tau \gg \max(\tau_d, \tau_{d^*}), \quad (18)$$

несколько упростим систему уравнений (13) – (16):

$$\dot{N}_s^* = PN_A - N_s^*/\tau + N_D^*/\tau_d - N_s^*/\tau_d; \quad (19)$$

$$\dot{N}_D^* = -N_D^*/\tau - N_D^*/\tau_d + N_s^*/\tau_d; \quad (20)$$

$$\dot{N}_D = N_D^*/\tau_d. \quad (21)$$

Предположим, что  $\tau_d^* \gg \tau_d$ , т. е. велика скорость процесса диффузии возбужденных адатомов (процесс г). Тогда за время  $\tau_d \ll \tau$  устанавливается квазиравновесная малая концентрация  $N_s^*$ , которая определяется уравнением (19) при условии  $\dot{N}_s^* = 0$ :

$$N_s^* \simeq \tau_d (PN_A + N_D^*/\tau_d^*). \quad (22)$$

Подставляя выражение (22) в уравнение (20), получаем

$$\dot{N}_D^* \simeq PN_A - N_D^*/\tau, \quad (23)$$

откуда следует, что для времен  $t \gg \tau$ , когда  $\dot{N}_D^* \simeq 0$ , квазиравновесная концентрация  $N_D^* \simeq PN_A \tau$ , а скорость образования дефектов, согласно выражениям (17) и (21), равна

$$\dot{N}_D \simeq PN_A \tau / \tau_d^*. \quad (24)$$

В противоположном случае, когда  $\tau_d^* \gg \tau_d$ , велика скорость передачи возбуждения (процесс в) и поэтому за время  $\tau_d^*$  устанавливается малая концентрация  $N_D^*$ . Полагая в уравнении (20)  $\dot{N}_D^* = 0$ , находим квазиравновесное значение  $N_D^* \simeq N_s^* \tau_d^* / \tau_d$  и, подставляя его в выражения (19) и (21), получаем

$$\dot{N}_s^* \simeq PN_A - N_s^*/\tau; \quad \dot{N}_D \simeq N_s^* / \tau_d. \quad (25)$$

Из первого уравнения (25) при  $t \gg \tau$ , когда  $\dot{N}_s^* \simeq 0$ , следует  $N_s^* \simeq PN_A \tau$ , так что скорость образования дефектов равна

$$\dot{N}_D \simeq PN_A \tau / \tau_d. \quad (26)$$

Сопоставляя уравнения (24) и (26) с выражением (17), получаем

$$P_{\text{eff}} = P \frac{\tau}{\max(\tau_d, \tau_d^*)} \gg P, \quad (27)$$

что соответствует определению  $\sigma_{\text{eff}}$  в выражении (12).

Итак, при выполнении условия (18) сечение (вероятность) образования дефекта, т. е. разупорядочения пленки водорода на вольфраме под действием пучка медленных электронов, эффективно возрастает на несколько порядков за счет быстрых процессов миграции колебательных возбуждений и диффузии возбужденных адатомов. Согласно проведенным

в работе [4] оценкам,  $\tau_a \sim \tau_d \sim \omega_0^{-1}$  и  $\tau^{(II)} \gg \tau^{(\perp)} \gg 10^3 \omega_0^{-1}$ , так что  $\sigma_{\text{eff}} \gg 10^3 \sigma_n^{(II)}$ . Если высота барьера, отсчитанная от нижайшего колебательного уровня в потенциальной яме рельефа подложки, составляет 0,2 эВ [1, 2], то надбарьерная диффузия идет через возбужденный квазиуровень с  $n=3$ , так что  $\sigma_{\text{eff}} \gg 10^3 \sigma_n^{(II)} \sim 10^{-2} a_0^2$ . Согласно экспериментальным данным работы [2], время разупорядочения пленки водорода на вольфраме составляло  $\tau_d \approx 2 \cdot 10^2$  с при плотности тока  $j \approx 10^{-5}$  А/см<sup>2</sup>, что соответствует сечению образования дефекта  $\sigma_{\text{exp}} \approx (j \tau_d)^{-1} \approx 5 a_0^2$ . Столь большое сечение трудно объяснить резонансным рассеянием с захватом падающего электрона на один из виртуальных электронных уровней адатома (например, на уровень сродства электрона), поскольку время жизни этих состояний слишком мало ( $\tau_s \leq 10^{-15}$  с). В то же время измеренное значение сечения  $\sigma_{\text{exp}} \sim (1-10) a_0^2$  может быть обеспечено за счет описанного выше механизма при условии  $\tau^{(II)} \sim 10^2 \tau^{(\perp)} \sim 10^{-9}$  с, что вполне реально при достаточно малой (~0,1) примеси  $p_x$ ,  $v$ -состояний адатома водорода на вольфраме [4]. Отметим также, что зависимость частоты  $\omega_0^{(II)}$  от степени покрытия  $\theta$ , обусловленная непрямым взаимодействием между адатомами водорода [4], должна приводить к различию скоростей разупорядочения для различных структур, что также наблюдается экспериментально [2].

Таким образом, представления о возбуждении электронным пучком квазилокальных колебаний адатомов с их последующей миграцией в пленке водорода на вольфраме позволяют снять противоречие между экспериментальными данными, полученными в работах [1-2], относительно возможности квантовой диффузии в системе H-W(110), а также дать качественное объяснение электронно-стимулированного разупорядочения в этой системе.

В заключение выражаем благодарность Ю. С. Ведуле, А. И. Волокитину, А. Г. Наумовцу и А. Г. Федорусу за многочисленные обсуждения различных вопросов, затронутых в настоящей работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. DiFoggio R., Gomer R. Phys. Rev., 1982, v. B25, № 6, p. 3490.
2. Гончар В. В., Каван Ю. М., Канащ О. В., Наумовец А. Г., Федорус А. Г. Журн. эксперим. и теор. физ., 1983, т. 84, № 1, с. 249.
3. Ho W., Willis R. F., Plummer E. W. Phys. Rev., 1980, v. B21, № 10, p. 4202.
4. Braun O. M., Pashitsky E. A. Физ. тв. тела, 1982, т. 24, № 7, с. 1973.
5. Persson B. N. J. Sol. St. Commun., 1979, v. 30, № 3, p. 163.
6. Ibach H. Surf. Sci., 1977, v. 66, № 1, p. 56.
7. Базы А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971, гл. 6.
8. Delanaye F., Lucas A., Mahan G. D. Surf. Sci., 1978, v. 70, № 2, p. 629.
9. Persson B. N. J. Sol. St. Commun., 1977, v. 24, № 8, p. 573.
10. Newns D. M. Phys. Lett., 1977, v. 60A, № 5, p. 461.
11. Наумовец А. Г. Укр. физ. журн., 1978, т. 23, № 10, с. 1585.
12. Davenport J. W., Ho W., Schrieffer J. R. Phys. Rev., 1978, v. B17, № 8, p. 3118.
13. Li C. H., Tong S. Y., Mills D. L. Phys. Rev., 1980, v. B21, № 8, p. 3057.

Институт физики АН УССР,  
Киев

Поступила в редакцию  
11.III.1983

#### THE OSCILLATION EXCITATION AND SURFACE DIFFUSION OF HYDROGEN ATOMS ON TUNGSTEN

Braun O. M., Pashitsky E. A.

An anomalously large value of the temperature independent (at low temperatures) coefficient of hydrogen-atom diffusion on a W(110) face and a great rate of the electron-stimulated disordering of hydrogen submonolayer films are explained qualitatively under the assumption that the adatom quasilocal oscillations, parallel to the surface, are excited by autoemission electrons or by a slow-electron beam with the subsequent migration of oscillation excitation and over-barrier diffusion of adatoms.