

Study of Ni(001) Surface Via I/E Curves in LEED Methods

Ebrahimi, F. & Zomorrodian, A. Z.

Ferdowsi University, Faculty of Sciences, Mashhad, Iran

Key words: *LEED, Ni Surface, Relaxation*

ABSTRACT: The reflected beam intensity as a function of electron energy (I/E curve) is studied for an ideal (001) Ni surface by low energy electron diffraction (LEED). Double layer method, renormalized forward scattering (RFS) and quasi-dynamic method are used for I/E curves calculation. The role of structural and nonstructural parameters of Ni on I/E curves is examined. The effect of the optical potential and number of scattered beams on these curves are also studied.

پژوهشی

مطالعه سطح (001)Ni با استفاده از محاسبه منحنی‌های I/E در روش (LEED)

فاطمه ابراهیمی و علیرضا زمردیان
دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده: طیف شدت موج بازتابش بر حسب انرژی در روش پراش الکترونهای کم انرژی (LEED) از یک سطح ایده‌آل نیکل (۰۰۱) مورد مطالعه قرار گرفته است. مشخصاً از روش‌های دو برابر کردن لایه، پراکنش رو به جلوی باز بهنجاریده * (RFS) و روش شبیه دینامیکی برای محاسبه منحنی‌ها استفاده شده است. در محاسبه منحنی‌های I/E سطح نیکل، نقش پارامترهای ساختاری و غیر ساختاری مورد بررسی قرار گرفته است. اثر پتانسیل جذبی و تعداد پرتوها بر این منحنی‌ها نیز بررسی شده است.

واژه‌های کلیدی: سطح نیکل، واهلش، LEED

مقدمه

در سالهای اخیر میزان توجه به پدیده‌های سطحی به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش یافته است. دلیل این امر عمدتاً لزوم ساخت قطعات بسیار کوچک الکترونیکی و تهیه لایه‌های برآرستی است. با وجود این به‌دلیل نداشتن آگاهی‌های لازم در مورد آرایه فضایی اتمها در ناحیه سطح، پدیده‌های اساسی مؤثر در آنها به خوبی شناخته شده نیست. وجود پیوندهای معلق در ناحیه سطح واهلش لایه‌های نزدیکتر سطح منجر به تفاوت‌هایی بین

* RFS : Renormalized Forward Scattering

ویژگیها و ساختار این ناحیه با بخش کپه‌ای می‌شود [۱]. روش مناسب برای یک ماده در بررسی ویژگیهای ساختاری آن انجام آزمایش‌های پراکندگی روی آن است. از آنجاکه سطح مقطع پراکندگی اتمی برای الکترونهای کم انرژی بزرگ است، عمق نفوذ آنها در بلور کوتاه است، بنابراین استفاده از الکترونهای کم انرژی وسیله مناسبی برای بررسی ویژگیهای ساختاری سطح خواهد بود. پراش الکترونهای کم انرژی (LEED) از قدیمی‌ترین روش‌های شناخت ساختارهای سطحی است [۲]. در این مقاله روش‌های محاسبه منحنی‌های E/I در پراش الکترونهای کم انرژی که اساس شناخت ویژگیهای اصلی ساختارهای سطحی است معرفی و این منحنی‌ها برای سطح نیکل Ni(001) محاسبه و تحلیل شده‌اند.

پراکنش کشسان الکترون با استفاده از پتانسیل با تقارن دو بعدی

بیشتر نمونه‌های مورد استفاده در LEED دارای تقارن دو بعدی به موازات سطح‌اند. چنین سطحی را می‌توان یک شبکه براوه دو بعدی با بردارهای پایه a و b در نظر گرفت. هر نقطه در شبکه سطحی به صورت ترکیب خطی این بردارها نوشته می‌شود. چون شبکه اصلی در سطح دو بعدی است لذا شبکه وارون نیز دو بعدی خواهد بود که این شبکه نقش اصلی را در پراش الکترونهای کم انرژی بازی می‌کند. در اینجا بدون این که وارد جزئیات شویم به بررسی جنبه‌های کلی مسئله پراش کشسان الکترون با تابع

موج تخت

$$\psi_i(r) = \exp(i k_0 r) \quad (1)$$

از یک سطح تمیز می‌پردازیم. در این رابطه k_0 تکانه خطی الکترون فرودی و E انرژی آن است. تابع موج پراکنده شده با توجه به پتانسیل مؤثر بر روی الکترون که آن نیز از یک تقارن دو بعدی برخوردار است به شکل زیر ربط داده می‌شود

$$\psi_s(r) = \sum_g \alpha_g(z) \exp[i(g + k_{11}) \cdot r_{11}] \quad (2)$$

که در آن g یک بردار دلخواه در شبکه وارون و k_{11} و r_{11} به ترتیب مؤلفه‌های تکانه و مکان موج تابشی موازی سطح و α_g ها توابع مختصه z در جهت عمود بر سطح هستند.

در جایی که پتانسیل ثابت است α_g هابه شکل ساده زیر نوشته می‌شوند

$$\alpha_g(z) = \beta_g \exp[\pm i (2E - |k_{011} + g|^2)^{1/2} z] \quad (3)$$

به این ترتیب امواج پراکنده شده به صورت مجموعه‌ای از امواج تحت پیش رونده و پس رونده خواهند بود [۳]

$$\psi(r) = \sum_g \beta_g \exp(i k_g \cdot r) \quad (4)$$

$$k_g = [k_{011} + g \pm (2E - |k_{011} + g|)^2]^{1/2} \quad (5)$$

با بزرگتر شدن کمیت $|k_{011} + g|$ ، مولفه عمود بر سطح موج کوچکتر می‌شود تا آنجا که این مقدار از $2E$ بزرگتر شود که در این صورت موج به صورت نمایی کاهش می‌یابد. بنابراین تعداد امواج رویت شده همواره محدود است.

آنچه که الگوی پراش نامیده می‌شود نقاط روشنی است که از برخورد هر یک از امواج تحت بازتابیده روی صفحه فلورسان دستگاه آشکارساز نقش می‌بندد. مطالعه این الگوها می‌تواند منجر به شناخت تقارن و ابعاد یاختهٔ یکه سطح شود. اکثر ساختارهای سطحی و شاید جالبترین آنها برای مطالعه، تشکیل لایه‌های جذبی اتمهای خارجی روی سطح تمیز یک نمونه است. معمولاً در جذب فیزیکی ترتیب اتمهای لایه رویی نامنظم و اثر آنها به صورت افزایش زمینه در شدت الگوها ظاهر می‌شود. در جذب شیمیایی که معمولاً آرایه اتمهای لایه رویی منظم است، نقاط جدیدی به الگوی پراش اضافه می‌شود که می‌توان آنها را پیش بینی کرد.

الگوهای LEED می‌توانند تناوب دو بعدی سطح و یا شبکه سطحی را مشخص کنند. اما واهلش بین لایه‌ها و مکان اتمهای پایه یاختهٔ یکه را نمی‌توان از الگوی پراش به دست آورد. در این گونه موارد برای تشخیص ساختار سطح از طیف شدت پرتوهای باز تاییده بر حسب انرژی الکترون ورودی استفاده می‌شود که برای هر ساختار یگانه است (برخلاف الگوی پراش که ممکن است برای ساختارهای متفاوت یکسان باشد).

روش معمول در تشخیص ساختار سطح نمونه مورد مطالعه، روش آزمون و خطای است. بدین صورت که نخست مدلی مناسب به عنوان مدل فرضی انتخاب شده و بر اساس آن طیف I/E محاسبه می‌شود. سپس این طیف را با طیف متناظر تجربی مقایسه می‌کنند. چنانچه طیف محاسبه شده با طیف تجربی برآش داشته باشد، مدل فرض شده مدل درستی برای ساختار سطح است. در غیر اینصورت، می‌بایست مدل را به نحو مناسبی تغییر داد و روش را تکرار کرد تا آنجاکه به برآش مناسبی بین نظریه و آزمایش

دست یابیم. معمول است که برای این کار از مفهوم ضریب اطمینان استفاده می‌کنند [۴]. لذا فراگرد شناخت ساختار سطح دو مرحله اساسی را شامل می‌شود: (۱) انتخاب مدل مناسب و محاسبه طیف I/E برای آن، (۲) مقایسه طیف محاسبه شده با طیف تجربی.

انتخاب مدل مناسب برای ساختارهای سطحی

تحلیل یک ساختار با انتخاب یک مدل فرضی مناسب آغاز می‌شود. این مدل باید شامل توصیف دقیقی از آرایه اتمها در کل لایه‌های اتمی باشد. طبیعی است که برای شروع در مدل انتخابی فرض می‌شود که اتمهای سطح یا لایه رویی همان مکانهایی را اشغال کرده‌اند که در حالت عادی با اتمهای کپه یا بستر اشغال شده است.

در محاسبه شدتها نه تنها مکان اتمهای پایه نسبت به یکدیگر، بلکه اطلاعات مربوط به پتانسیل بلور نیز باید منظور شوند. توضیح آنکه، مدل رایج پتانسیل عبوری، تقریب Muffin Tin است. در این مدل، بلور متشکل از یک رشته کره‌های غیر هم پوشان فرض می‌شود که در پتانسیل ثابتی قرار گرفته‌اند. در داخل این کره‌ها یا مغزهای یونی، پتانسیل دارای تقارن کروی است و پراکندگی الکترون بوسیله هر کره با یک رشته جایه‌جایی فاز^۱ محسوبه می‌شود. پتانسیل ثابت در خارج از مغز یونی شامل یک جزء حقیقی (پتانسیل داخلی) و یک جزء موهومی (پتانسیل جذبی) است. به همین دلیل به آن پتانسیل اپتیکی گویند. مقدار دقیق پتانسیل اپتیکی با روش آزمون و خطأ و بر اساس مقایسه طیف تجربی و نظری به دست می‌آید.

I/E روش‌های محاسبه منحنی‌های

در این جا برخی از روش‌های محاسبه منحنی‌های I/E در دمای صفر مطلق معرفی خواهد شد. منظور از منحنی I/E طیف شدت یک موج بازتابی معین به ازای انرژی‌های متفاوت است که برای هر ساختار منحصر به فرد خواهد بود. محاسبات مربوط به منحنی‌های I/E به علت برهم کنش شدید الکترون‌های کم انرژی با جامد خیلی پیچیده است زیرا احتمال پراکندگی چندگانه برای چنین الکترون‌هایی زیاد است. به این دلیل، در مطالعه پراش LEED نظریه سینماتیکی کاربرد چندانی ندارد و به جای آن از نظریه دینامیکی استفاده می‌کنند. نظریه دینامیکی LEED در اوایل دهه هفتاد میلادی تکوین

یافت و پس از آن بیشتر جهت سرعت و سهولت در محاسبات توسعه پیدا کرد. در فرمولبندی رایج که منتهی به برنامه‌های کامپیوتری برای بلورنگاری دینامیکی LEED می‌شوند، حل مسئله در چارچوب مدل پراش چندگانه صورت می‌گیرد. به این معنی که نخست یک اتم منفرد و سپس پراش چندگانه مجموعه‌ای از اتمها مورد بررسی قرار می‌گیرد. این فرآگرد شامل سه مرحله است: (۱) محاسبه پراش چندگانه از یک اتم منفرد، (۲) محاسبه پراش چندگانه در داخل یک لایه اتمی، و (۳) محاسبه پراش چندگانه بین لایه‌های اتمی.

همانطور که قبلاً نیز گفته شد، محاسبه پراکندگی یک موج تخت از یک کره، با تعداد محدودی جابجایی فاز انجام می‌شود. مرحله دوم که محاسبه پراش چندگانه از یک صفحه اتمی را شامل می‌شود، با ماتریس پراکندگی مربوط به صفحه انجام می‌شود. زیرا همانطور که گفته شد، هر موج تخت هنگام برخورد به یک لایه اتمی به تعدادی موج تخت دیگر پراکنده می‌شود و این فرایند برای هر موج تخت پراکنده شده نیز از طریق لایه‌های مجاور رخ می‌دهد. بنابراین بین لایه‌ها مجموعه‌ای از امواج تخت پیش‌رونده و پس‌رونده داریم که دامنه آنها با ماتریسهای پراکندگی لایه‌ای بهم مربوط می‌شوند. محاسبه این ماتریسهای خود مشکل وقت گیر است. برای محاسبه پراش چندگانه از مجموعه‌ای از اتمها، مدل دیگری موسوم به مدل زنجیره‌ای وجود دارد که در آن نخست پراش از زنجیره‌هایی از اتمها، و سپس پراش از صفحه‌ای مرکب از زنجیره‌ها محاسبه می‌شود.

مرحلهٔ نهایی محاسبه پراش از مجموعه‌ای از لایه‌ها است. برای این منظور مدل‌های متفاوتی وجود دارند که برخی کاملاً دقیق و برخی مبتنی بر روش‌های تقریبی و نظریه اختلالند. کلی ترین و دقیق ترین روش حل مسئله پراش چندگانه از یک بلور نیمه متناهی روش امواج بلاخ یا شیوه‌های بهنجار است. از این روش به دلیل مفصل بودن محاسبات و نتایج حاصله کمتر استفاده می‌شود. در این مطالعه خلاصه دو روش را که نسبت به روش بالا از کلیت کمتری برخوردارند ولی در عین حال در بسیاری موارد نتایج نسبتاً دقیقی را ارائه می‌دهند بیان می‌داریم.

الف) روش دو برابر کردن لایه ها

در روش دو برابر کردن لایه ها، بازتاب الکترونهای فرودی از بلور به طریق انباست لایه ها بر روی هم محاسبه می شود. به این ترتیب که محاسبه نخست از دو لایه تک اتمی شروع می شود. سپس روش را تکرار کرده و ماتریسهای پراکندگی را برای بلوری با هر ضخامت دلخواه محاسبه می کنند [۵ و ۶]. در عمل تعداد لایه های بکار رفته محدود است زیرا به دلیل جذب شدید الکترونهای فرودی، همگرایی به سرعت حاصل می شود. در حالت کلی حدود هشت لایه اتمی برای حصول نتیجه های که تنها به میزان یک درصد با مقدار واقعی تفاوت دارد کافی است.

ب) روش RFS

تعدادی از روش های حل مسئله LEED بر پایه نظریه اغتشاش استوارند. از بین این روش ها روش RFS یکی از بهترین و مؤثر ترین روش هاست [۳ و ۷]. در روش RFS تمام فرایندهای پس پراکندگی از لایه های اتمی به عنوان اغتشاش وارد مسئله می شوند. پراکندگی های دیگر نظیر پیش پراکندگی از لایه های اتمی و پراکندگی درون لایه ای دقیقاً در محاسبات وارد می شوند. این پدیده از آنجا سرچشمه می گیرد که بنابرنتایج به دست آمده در اندازه گیری های تجربی شدت پرتو های پس پراکنده همواره در مقایسه با پرتو های پیش پراکنده کوچک بوده است. در روش RFS پراکندگی امواج از لایه های واقع در عمق بلور به صورت اغتشاش بررسی می شوند. بنابراین برای حصول همگرایی، لازم است که تعداد مناسبی از لایه ها و نیز بازتاب های لایه ای مورد بررسی قرار گیرند.

در اکثر موارد در این روش همگرایی به سرعت حاصل می شود. حسن این روش سرعت قابل ملاحظه در محاسبه منحنی ها است. زمان لازم برای اجرای محاسبات کامپیوتری از این روش در حدود نصف زمان لازم در مقایسه با روش دو برابر کردن لایه هاست.

پ) روش شبیه دینامیکی

تقریب شبیه دینامیک از آن جهت با مدل تمام دینامیکی تفاوت دارد که در آن از پراکندگی

چند گانه در یک لایه اتمی چشم پوشی می‌شود. به عبارت دیگر در این مدل به جای ماتریس‌های پراکنده‌گی چند گانه‌لایه‌ای از ماتریس‌های پراکنده‌گی مدل سینماتیکی استفاده می‌شود. این روش برای انرژی‌های بالاتر از 150° الکترون ولت و برای برخورد عمودی بهتر کار می‌کند. از آنجا که وقت‌گیرترین بخش محاسبات در مدل دینامیکی محاسبات مربوط به ماتریس‌های پراکنده‌گی است، برتری روش شبه دینامیکی به دلیل سرعت زیاد و سهولت انجام محاسبات آن نسبت به مدل دینامیکی است [۸].

برداشتها

در اینجا در محاسبات مربوط به منحنی‌های I/E از کد LEED استفاده کردیم [۳]. برای محاسبه شدت پرتوهای بازتابیده مبنی بر مدل شبه دینامیکی و مدل سینماتیکی دوزیر برنامه به آن افزود شده‌اند [۹]. برنامه LEED می‌تواند شدت امواج پس‌پراکنده از ساختارهای مختلف با پایه تک اتمی را بر اساس مدل‌های دینامیکی و شبه دینامیکی و سینماتیکی محاسبه کند. برای محاسبه پراکنده‌گی بین لایه‌ها می‌توان هم از روش RFS و هم از روش دو برابر کردن لایه‌ها استفاده کرد.

پارامترهای ساختاری و غیر ساختاری از جمله داده‌های ورودی به این برنامه‌اند.

پارامترهای غیر ساختاری که می‌بایست به برنامه داده شوند عبارتند از δ ‌ها (جابجایی فازها) و V_{oi} که کمیت اخیر با رابطه $|V_{oi}|/\tau = \delta$ به طول عمر الکترون‌های فرودی مربوط است. V_{oi} مسؤول کاهش شار الکترونها و در نتیجه پهن شدگی قله‌های فرودی است. به کمک اصل عدم قطعیت می‌توان انرژی، زمان پهن شدگی قله‌ها را تخمین زد. بنابراین اصل، پهن شدگی قله‌ها به اندازه E به صورت زیر به V_{oi} مربوط می‌شود

$$\Delta E \geq 2 |V_{oi}| \quad (6)$$

پارامترهای غیر ساختاری دیگری که لازم است در برنامه وارد شوند عبارتند از بردارهای شبکه مستقیم، طول یاخته‌یکه و مختصات آن دسته از بردارهای شبکه وارون که در پراکنده‌گی شرکت می‌کنند. هم چنین مرتبه تقارن در این مقاله تعداد پرتوهای محوری در راستای عمود بر سطح نیز باید به برنامه داده شود. در این مقاله محاسبه مربوط به منحنی‌ها با استفاده از برنامه LEED برای $N = 13$ پرتو اجرا شده است.

پارامترهای ساختاری سطح (001) نیکل

ساختار نیکل fcc است با ثابت شبکه $a = ۳۵۲\text{\AA}$. سطح (001) ساختار fcc دارای یاخته‌ای به شکل مربعی مرکزدار است، بنابراین از هر اتم آن یک محور با تقارن چهارتایی به سطح عمود می‌شود. بردارهای پایه a_1 و a_2 چنین ساختاری را می‌توان به شکل زیر انتخاب کرد

$$a_1 = a (1/2, 1/2) \quad a_2 = a (-1/2, 1/2)$$

شبکه وارون سطح نیز دارای بردارهای پایه به صورت زیر است

$$A_1 = 4\pi/a (1/2, 1/2) \quad A_2 = 4\pi/a (-1/2, 1/2)$$

به این ترتیب ساختار شبکه وارون نیز مربعی مرکزدار با طول ضلع $4\pi/a$ است. بردارهای شبکه وارون را می‌توان بر حسب طول از کوچک به بزرگ طبقه بندی کرد

(0,0)

(0,-1), (-1,0), (0,1), (1,0)

(-1,-1), (-1,1), (1,-1), (1,1)

(0,-2), (0,2), (-2,0), (2,0)

پارامترهای غیر ساختاری نیکل

چنانکه گفته شد پارامترهای غیر ساختاری لازم برای اجرای برنامه شامل جابه‌جایی فازها و پتانسیل اپتیکی‌اند. روش‌هایی برای محاسبه هردوی اینها وجود دارد. محاسبه جابه‌جایی فازها با استفاده از برنامه‌های کامپیوتری انجام می‌گیرد. مقادیر پیشنهادی برای پتانسیل اپتیکی به صورت زیر است

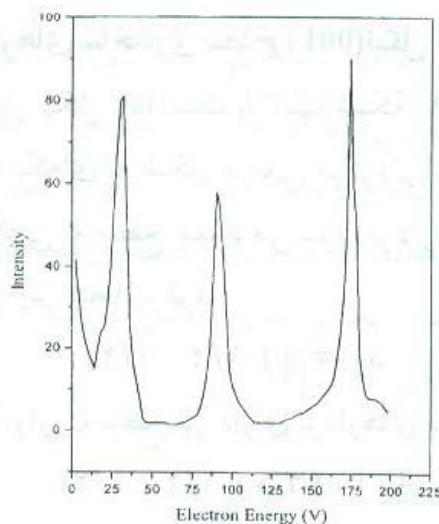
$$V_{oi} = -1 \text{ eV} \quad E < 15 \text{ eV}$$

$$V_{oi} = -4 \text{ eV} \quad E > 15 \text{ eV}$$

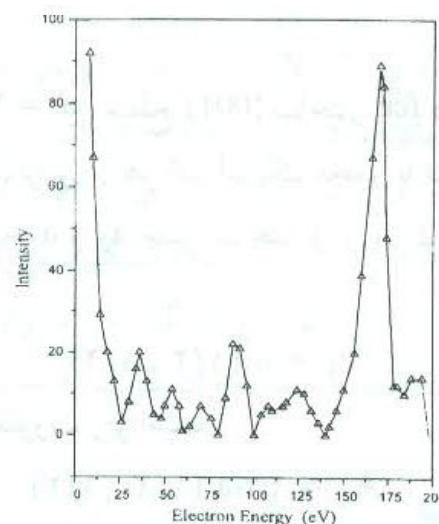
$$V_{oi} = -18 \text{ eV}$$

نتایج تمام دینامیکی

در شکل ۱ طیف I/E پرتو (00) از سطح (001) نیکل در بازه ۰-۲۰۰ eV نشان داده شده است. در این منحنی فرود پرتو الکترونی عمودی بوده و از دو روش RFS و دو



(شکل ۲)



(شکل ۱)

شکل ۱ - طیف (00) از سطح (001) نیکل در فرود عمودی الکترونها به روش‌های تمام دینامیکی (خط پر) و دو برابر کردن لایه (خط چین) با تعداد بردارهای پراکننده $N = 13$.

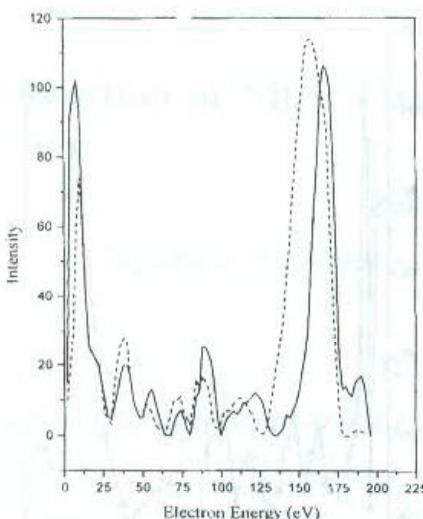
شکل ۲ - طیف (00) از سطح (001) نیکل در فرود عمودی به روش سینماتیکی.

برابر کردن لایه برای محاسبات استفاده شده است. در شکل ۲ نتایج مدل سینماتیکی برای مقایسه رسم شده است. مقایسه این دو شکل اختلاف زیاد در نتایج محاسبه شده از دو مدل را نشان می‌دهد. این تفاوت‌ها در جایگاهی محل قله‌ها و پهن شدگی آنها پیداست. در عوض نتایج روش‌های RFS و دو برابر کردن لایه‌ها با دقت زیادی با هم سازگارند. بنابراین با اطمینان می‌توان از تقریب RFS که موجب سرعت محاسبات می‌شود، استفاده کرد. در این محاسبات تعداد بردارهای شرکت کننده در پراکننده $N = 13$ در نظر گرفته شده است.

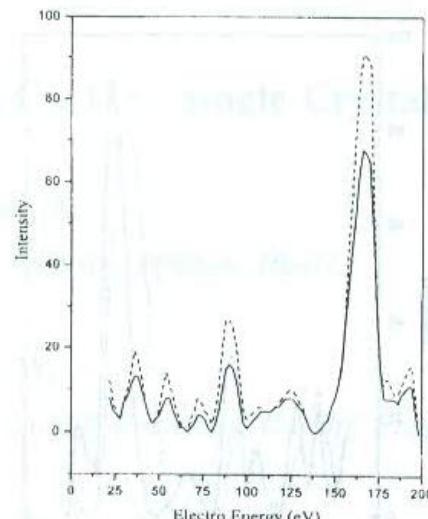
اکنون این سؤال مطرح است که اثر پارامترهای ساختاری و غیر ساختاری روی منحنیها چگونه است. برای پاسخگویی به این سؤال موارد زیر را بررسی می‌کنیم

الف) اثر پتانسیل جذبی

برای بررسی اثر کاهش اندازه V_{0i} بر نتایج، مقدار ۳- را به جای ۴- می‌نشانیم. چنانکه انتظار می‌رفت تأثیر این کار افزایش ارتفاع قله‌های است، بدون این که اثر چندانی بر مکان آنها داشته باشد (شکل ۳).



(شکل ۴)



(شکل ۳)

شکل ۳ - مقایسه طیف (00) از سطح (001) در فرود عمودی از روش RFS برای $V_{0i} = -3 \text{ eV}$ (خط چین) و $V_{0i} = -4 \text{ eV}$ (خط پر).

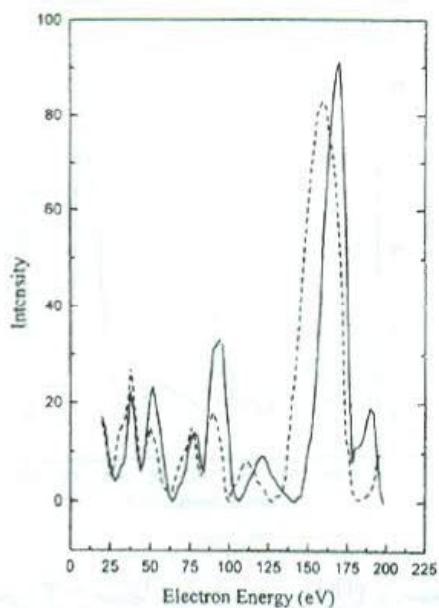
شکل ۴ - طیف (00) از سطح (001) نیکل با فرض واهلش لایه اول به میزان 13% آنگستروم از روش دو برابر کردن لایه (خط چین).

ب) اثر واهلش لایه اول

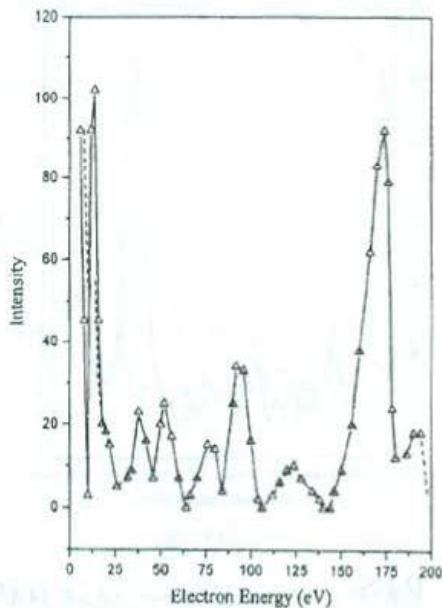
در شکل ۴ اثر واهلش لایه اول به میزان 13% آنگستروم به روش دو برابر کردن لایه ها محاسبه شده است. همانطور که ملاحظه می شود علاوه بر تغییر ارتفاع قله ها جابجایی تقریباً یکنواختی به سمت انرژی های کمتر در مکان آنها نیز مشاهده می شود.

پ) مقایسه نتایج شبه دینامیکی و تمام دینامیکی

در شکل ۵ منحنی سطح ایده آل نیکل با روش شبه دینامیکی محاسبه شده است. ملاحظه می شود که نه تنها موقعیت قله ها، بلکه تا حدودی ارتفاع آنها نیز قابل پیش بینی بر اساس مدل شبه دینامیکی است. هم چنین اثر واهلش لایه اول بر روی طیف شبه دینامیکی مشابه اثر آن بر طیف تمام دینامیکی است (شکل ۶). در این شکل ها برای محاسبه پراکندگی بین لایه ها از روش دو برابر کردن لایه ها استفاده شده است. به این ترتیب بجاست که در مراحل ابتدایی تشخیص ساختار سطح به روش آزمون و خطا، از مدل شبه دینامیکی استفاده کرد، گرچه بهتر است قضاوت نهایی را از طریق روش های تمام دینامیکی انجام داد.



(شکل ۶)



(شکل ۵)

شکل ۵ - طیف (00) از سطح (001) نیکل در فرود عمودی در روش شبیه دینامیکی دو برابر کردن لایه (نقطه چین). نقاط مشخص شده از روش RFS محاسبه شده‌اند.

شکل ۶ - اثر واهلش لایه اول به میزان ۱۳٪ آنگستروم (خط چین) بر طیف (00) شبیه دینامیکی.

مراجع

1. Prutton M., *Surface Physics*, (1975), Clarendon Press ,Oxford,.
2. Mac Rea A.U., *Science*, (1963), **139**, 379.
3. Pendry J. B., *Low Energy Electron Diffraction*, Academic Press, London,(1974)
4. Van Hove M. A. and Koster R.J., *In Determination of Surface Structure by LEED*,(1984),Plenum Press, New York,.
5. Van Hove M.A. and Pendry J.B. *J. Phys.*,(1975), **C8**, 1362.
6. Adams D.L., *J. Phys.*,(1983), **C16**, 6101.
7. Pendry J.B., *Phys. Rev. Lett.*,(1971), **27**, 856.
8. Heinz K. et. al., *J. Phys.*,(1985), **C18**, 933.
9. Heinz K., *Appl. Phys.*,(1986), **A41**, 3.