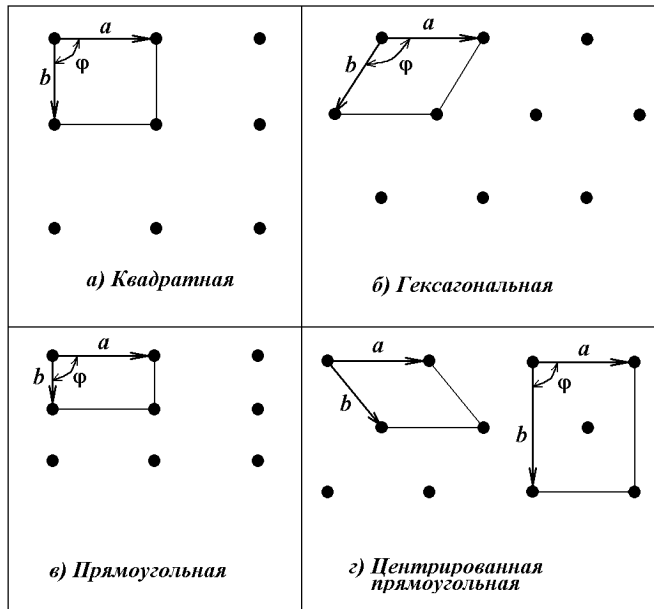


Двумерные решетки описывается пятью основными типами решеток, называемых *решетками Браве*.



Векторы примитивных трансляции \mathbf{a} и \mathbf{b} могут быть представлены в следующем виде:

$$\mathbf{a} = a_x \mathbf{e}_x + a_y \mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{b} = b_x \mathbf{e}_x + b_y \mathbf{e}_y,$$

где \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y единичные векторы x и y осей координатной системы.

Если векторы \mathbf{a} и \mathbf{b} зеркально отразить относительно оси x , то получим новые векторы \mathbf{a}' и \mathbf{b}' :

$$\mathbf{a}' = a_x \mathbf{e}_x - a_y \mathbf{e}_y \quad \mathbf{b}' = b_x \mathbf{e}_x - b_y \mathbf{e}_y$$

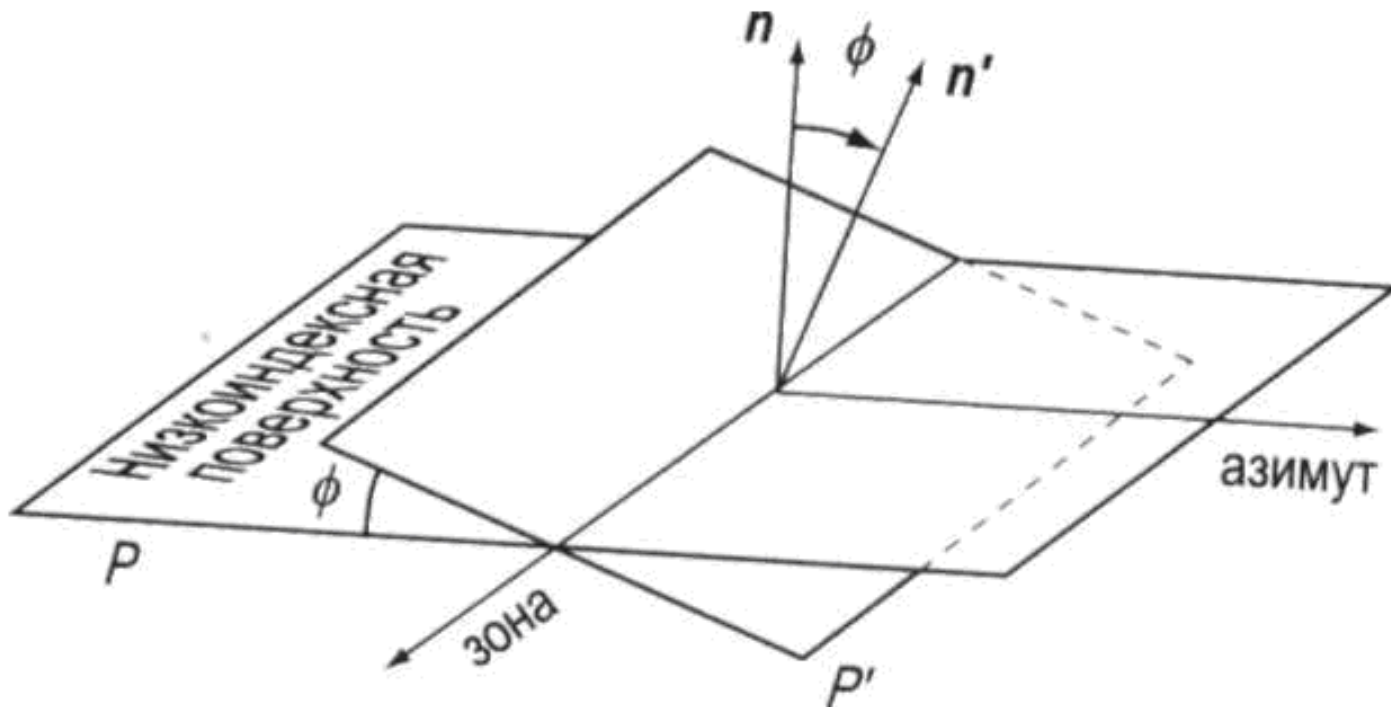
Если

$$\mathbf{a} = a\mathbf{e}_x \quad \text{и} \quad \mathbf{b} = b\mathbf{e}_y, \quad (1.1)$$

то $\mathbf{a} = \mathbf{a}'$ и $\mathbf{b} = -\mathbf{b}'$, так что решетка повторяет себя. Решетка, определяемая соотношением (1.1) является прямоугольной.

Структура поверхностного слоя

Плоскость кристалла может быть разориентирована относительно некоторой низкоиндексной плоскости на небольшой угол, тогда она может быть описана комбинацией трех параметров: **угла наклона**, **азимута наклона** и **зоны наклона**.

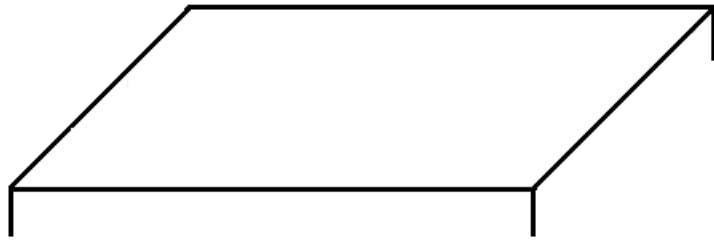


Разориентированная плоскость P' получается путем поворота низкоиндексной плоскости P вокруг оси зоны в сторону направления азимута на угол разориентации ϕ . Векторы n и n' - нормали к плоскостям P и P' соответственно

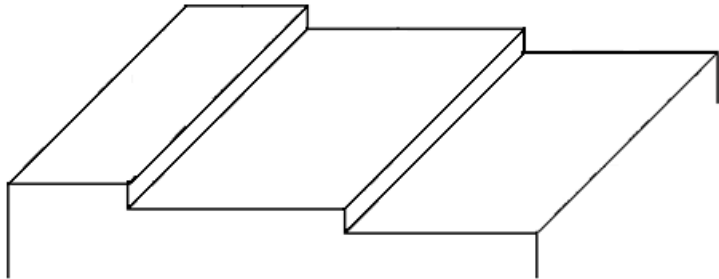
Ступени, сингулярные и вицинальные поверхности.

Атомарно гладкие поверхности называются *сингулярными* *поверхностями*

Поверхности, которые образуют малый угол θ с сингулярной поверхностью, называются *вицинальными* *поверхностями*.



Модель сингулярной поверхности

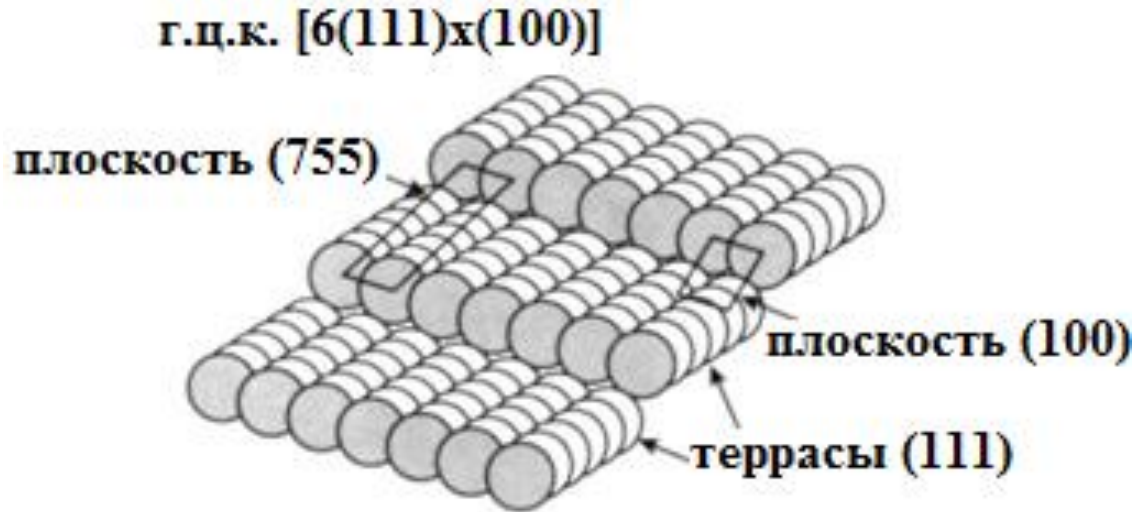


Модель вицинальной поверхности

Поверхностная энергия кристалла, которую также называют *поверхностным натяжением* по аналогии с жидкостями, - это работа, которую надо совершить для создания поверхности кристалла единичной площади.

При $T = 0$ К поверхностная энергия приблизительно равна полусумме энергий всех межатомных связей, которые надо разорвать, чтобы получить данную поверхность.

Ступенчатая (вициальная) поверхность, состоит обычно из узких террас, разделенных ступенями моноатомной высоты (причем ступени могут содержать изломы).



Существует запись, (Lang, Joynner, Somorjai) описывающая структуру ступенчатой поверхности в виде

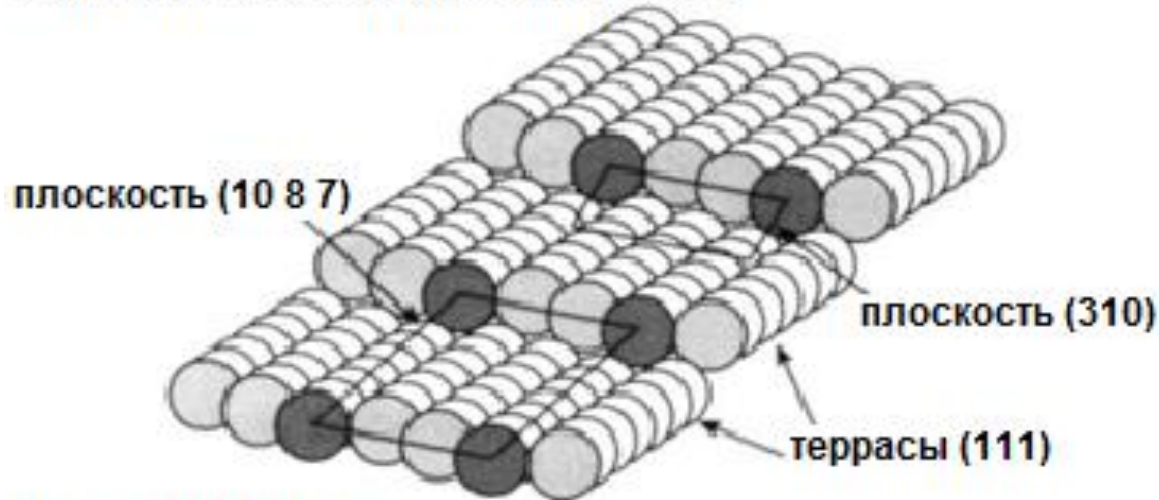
$$n(h_t k_t l_t) \times (h_s k_s l_s)$$

n - число атомных рядов на террасе, параллельных краю ступени;
 $(h_t k_t l_t)$ и $(h_s k_s l_s)$ - индексы Миллера плоскости террасы и плоскости ступени, соответственно.

Поверхность (755) г.ц.к. кристалла может быть описана как $6(111) \times (100)$, так как она состоит из террас (111) шириной в 6 атомных рядов, разделенных моноатомными ступенями с ориентацией (100).

Ступенчатая поверхность, на которой ступени сами представляют собой высокоиндексные поверхности, является поверхностью с изломанными ступенями (*kinked surface*).

г.ц.к. $[7(111) \times (310)]$ или г.ц.к. $(10\ 8\ 7)$



г.ц.к. кристалл.

Ступени на поверхности $(10\ 8\ 7)$ содержат изломы.

Пример поверхности с изломанными ступенями (*kinked surface*):

поверхность $(10\ 8\ 7)$ (то есть $(111) \times (310)$) г.ц.к. кристалла.

Поверхность $(10\ 8\ 7)$ г.ц.к. кристалла состоит из террас (111) шириной в 7 атомных рядов, разделенных моноатомными ступенями с ориентацией (310) . Такая поверхность может быть описана как $7(111) \times (310)$.

Описание структуры поверхности

Структура поверхностного слоя может сильно отличаться от структуры нижележащих объемных слоев кристалла.

Для обозначения специфической структуры верхнего атомного слоя (или нескольких слоев) используют термин **суперструктура**.

Запись для описания **суперструктуры** связывает ее двумерную решетку с решеткой идеальной плоскости подложки.

Матричная запись.

Запись предложена Парком и Мадденом (Park, Madden).

Определяется матрица, устанавливающая связь между векторами примитивных трансляций поверхности и векторами примитивных трансляций идеальной плоскости подложки.

Если \mathbf{a}_s , \mathbf{b}_s – векторы трансляций суперструктуры и \mathbf{a} , \mathbf{b} - векторы трансляций плоскости подложки, то они могут быть описаны соотношениями:

$$\mathbf{a}_s = G_{11}\mathbf{a} + G_{12}\mathbf{b}$$

$$\mathbf{b}_s = G_{21}\mathbf{a} + G_{22}\mathbf{b}$$

Описание структуры поверхности

и суперструктура может быть представлена в виде матрицы

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

Элементы матрицы G_{ij} показывают, является ли структура поверхности *соразмерной* (соотношения между векторами $\mathbf{a}_s, \mathbf{b}_s$ и \mathbf{a}, \mathbf{b} выражены рациональными числами) или *несоразмерной* (соотношения между векторами $\mathbf{a}_s, \mathbf{b}_s$ и \mathbf{a}, \mathbf{b} выражены иррациональными числами) подложке.

Несоразмерная суперструктура не связана когерентно с решеткой нижележащей подложки.

Запись Вуда

Указывается отношение длин векторов примитивных трансляций суперструктуры и плоскости подложки. А если необходимо, то еще указывается и угол, на который следует повернуть элементарную ячейку поверхности, чтобы ее оси совместились с векторами примитивных трансляций подложки.

Таким образом, если на поверхности подложки $X(hkl)$ образовалась суперструктура с векторами примитивных трансляций

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b|$$

и углом поворота φ° , то эта структура поверхности описывается в виде

$$X(hkl)m \times n - R\varphi^\circ$$

Если оси элементарной ячейки совпадают с осями подложки, то есть $\varphi^\circ = 0$, то нулевой угол поворота не указывается (например, Si(111)7×7).

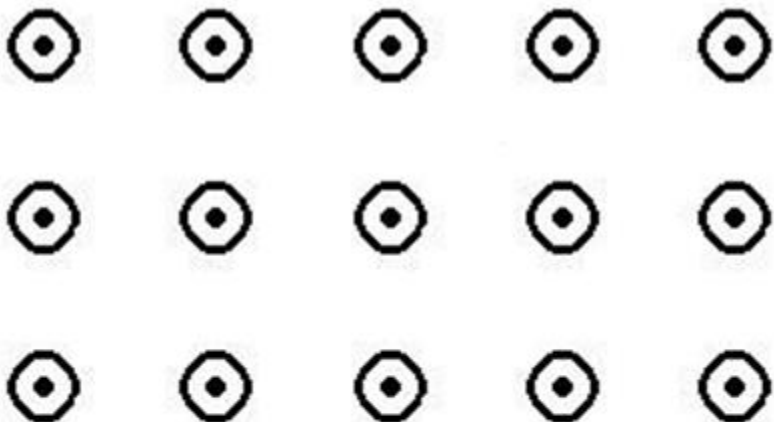
Для обозначения центрированной решетки используется буква c (например, Si(100) c (4×2)).

Если образование суперструктуры вызвано адсорбатом, то в конце записи указывается химический символ этого адсорбата (например, Si(111)4×1-In).

Запись Вуда применима только в тех случаях, когда внутренние углы элементарных ячеек суперструктуры и подложки совпадают. Это условие выполняется, когда обе решетки принадлежат к одному типу решеток Браве или когда одна решетка квадратная, а другая прямоугольная.

Примеры применения обозначений

Узлы двумерной решетки подложки показаны черными точками, узлы решетки суперструктуры - белыми кружками.



Квадратная решетка.

Ячейка суперструктуры имеет тот же размер и ту же ориентацию, что и элементарная ячейка подложки, то есть обе решетки совпадают.

Суперструктура описывается.



Матричная запись (Park, Madden):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$a_s = G_{11}a + G_{12}b$$

$$b_s = G_{21}a + G_{22}b$$

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

Запись Вуда:

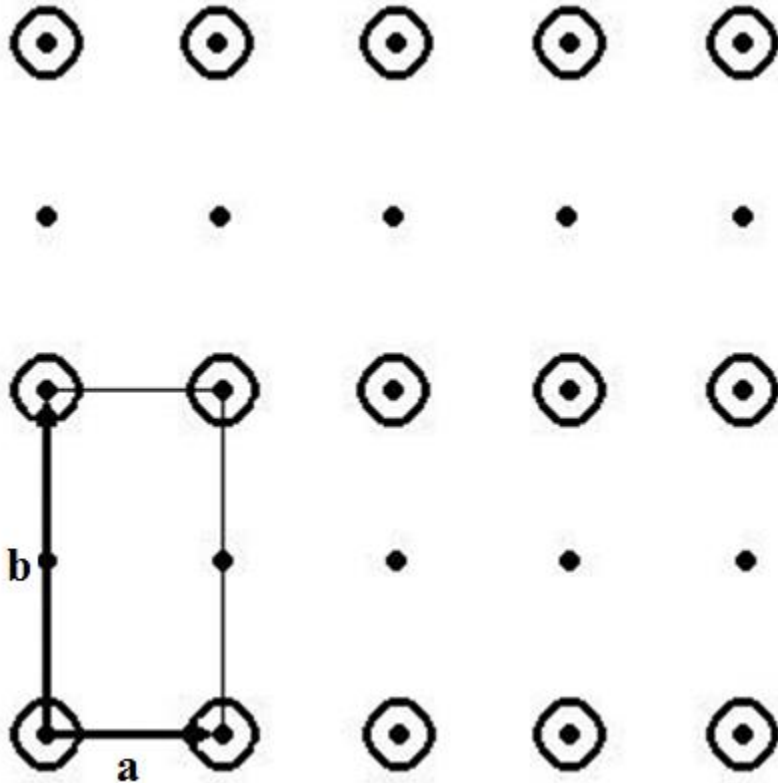
$$(1 \times 1)$$

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b|$$

$$X(hkl)m \times n - R\varphi^\circ$$

Квадратная двумерная решетка.

Ячейка суперструктуры в 2 раза длиннее ячейки подложки вдоль одной оси и имеет ту же длину вдоль другой оси.



Матричная запись (Park, Madden):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Запись Вуда:

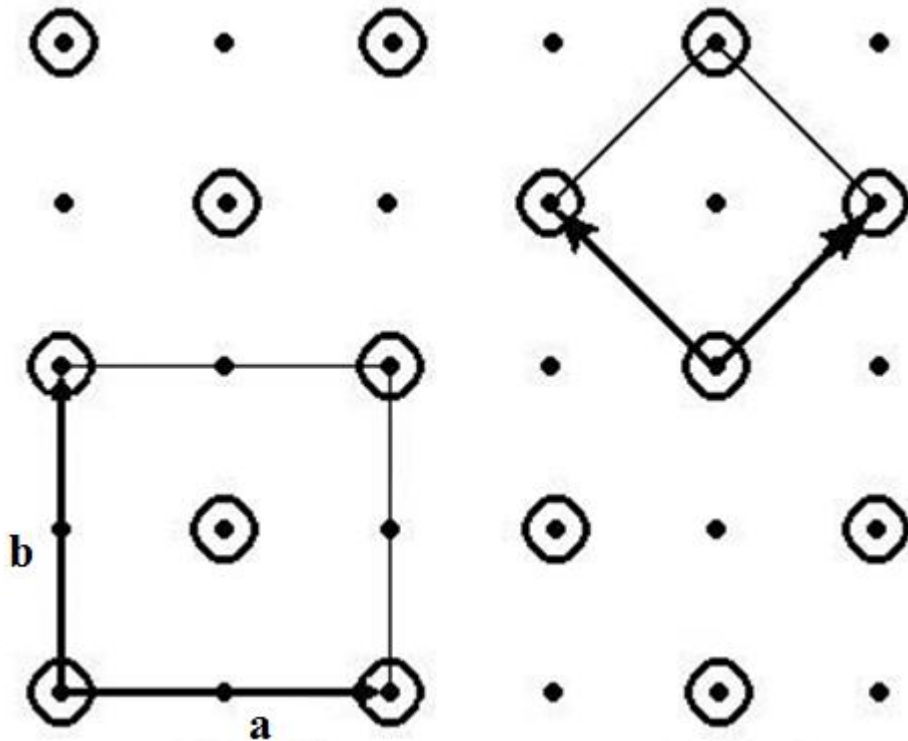
$$(1 \times 2)$$

$$\begin{aligned} a_s &= G_{11}a + G_{12}b \\ b_s &= G_{21}a + G_{22}b \end{aligned} \quad G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b| \quad X(hkl)_{m \times n} - R\varphi^\circ$$

Квадратная двумерная решетка.

Показанная суперструктура может быть описана тремя различными способами.



по Вуду:

1) она может быть записана в виде

$$c(2 \times 2)$$

так как ее элементарная ячейка может быть представлена как

$$(2 \times 2)$$

с дополнительным узлом в центре.

Если рассматривать примитивную ячейку,

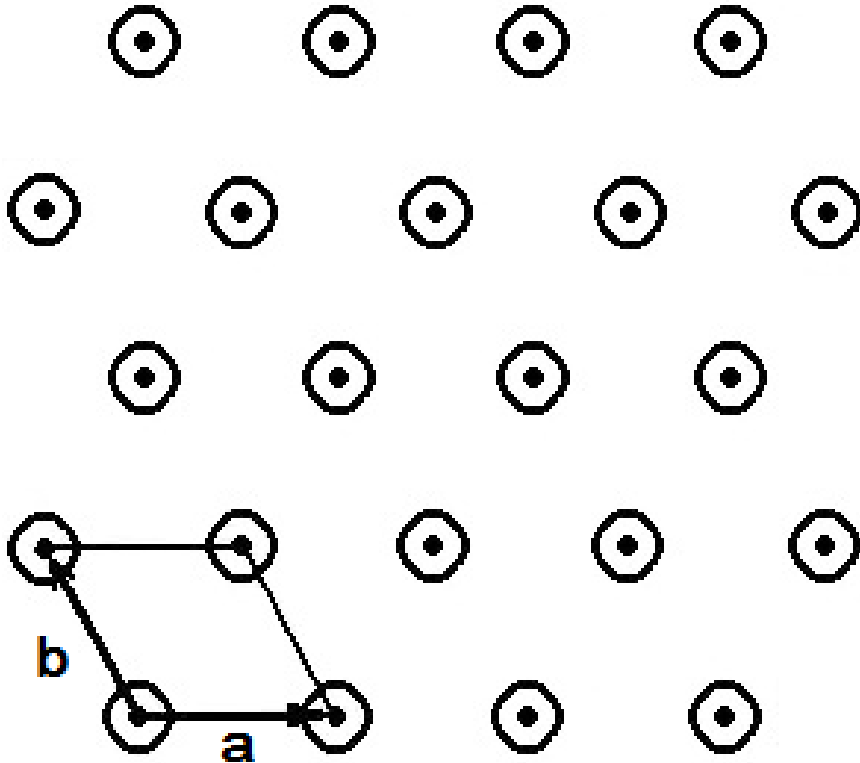
2) то суперструктуру можно записать $\sqrt{2} \times \sqrt{2} R45^\circ$

3) Матричная запись:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Гексагональная решетка

Узлы двумерной решетки подложки показаны черными точками, узлы решетки суперструктуры - белыми кружками.



Ячейка суперструктуры имеет тот же размер и ту же ориентацию, что и элементарная ячейка подложки, то есть обе решетки совпадают. Суперструктура описывается.

Матричная запись (Park, Madden):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Запись Вуда:

$$(1 \times 1)$$

$$\begin{aligned} a_s &= G_{11}a + G_{12}b \\ b_s &= G_{21}a + G_{22}b \end{aligned}$$

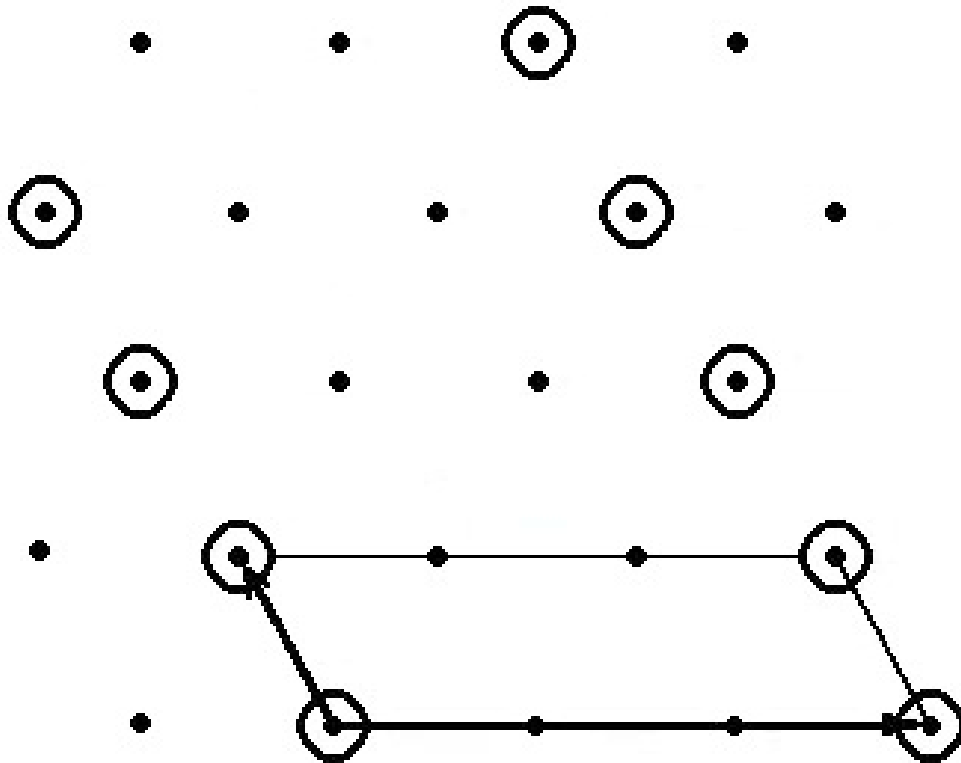
$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b|$$

$$X(hkl)m \times n - R\varphi^\circ$$

Гексагональная решетка

Ячейка суперструктуры в 3 раза длиннее ячейки подложки вдоль одной оси и имеет ту же длину вдоль другой оси.



Матричная запись
(Park, Madden):

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

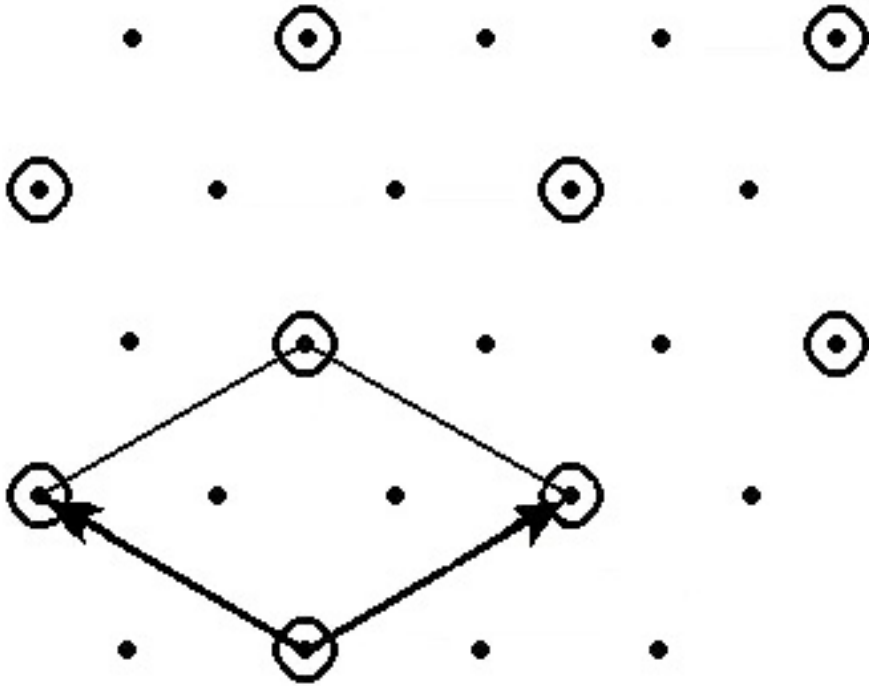
Запись Вуда:

$$(3 \times 1)$$

$$\begin{aligned} a_s &= G_{11}a + G_{12}b \\ b_s &= G_{21}a + G_{22}b \end{aligned} \quad G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b| \quad X(hkl)m \times n - R\varphi^\circ$$

Гексагональная решетка



$$\begin{aligned} a_s &= G_{11}a + G_{12}b \\ b_s &= G_{21}a + G_{22}b \end{aligned} \quad G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b| \quad X(hkl)m \times n - R\varphi^\circ$$

Запись Вуда:

суперрешетка $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$

в которой векторы
примитивных трансляций в $\sqrt{3}$

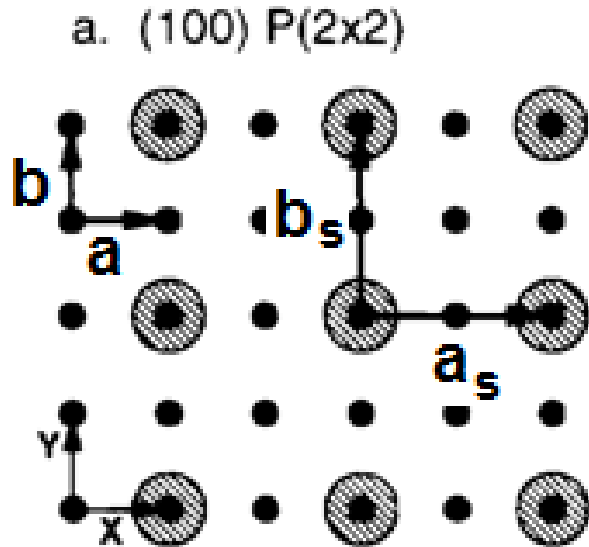
раз длиннее векторов примитивных
трансляций решетки подложки, а угол
поворота составляет 30° .

Матричная запись (Park, Madden):

В матричной записи эта суперрешетка
описывается как

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{a}_s, \mathbf{b}_s$ – векторы трансляций суперструктуры и \mathbf{a}, \mathbf{b} – векторы трансляций плоскости подложки.



Адаптомы - светлые кружки;

Атомы подложки – точки;

Квадратная элементарная ячейка.

Плоскость (100)

Приведенное взаимное расположение атомов может иметь место на начальной стадии эпитаксиального роста пленки на плоскости (100) объемно-центрированной и гранецентрированной кубической решетке.

Для случая, приведенного на рисунке: $a_s = 2a$ и $b_s = 2b$, так, что

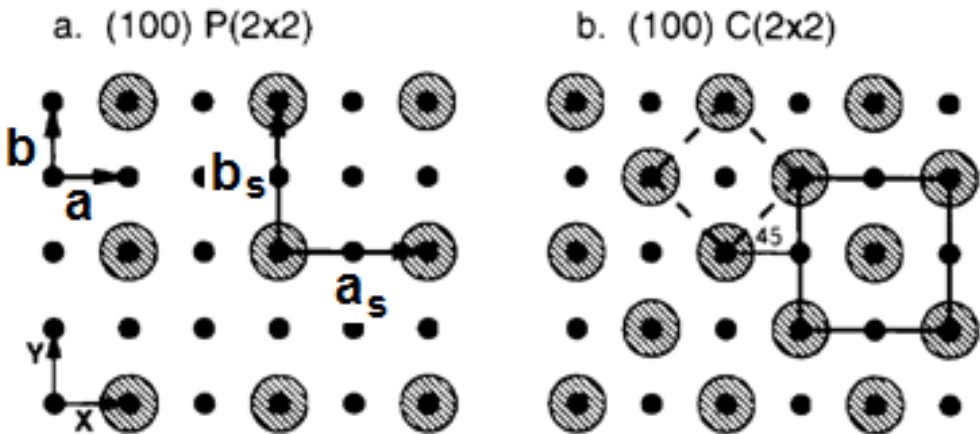
Запись Вуда: $P(2 \times 2)$

Матричная запись: $G_{ij} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Это случай примитивной $P(2 \times 2)$ элементарной ячейки напыленного слоя, содержащей один атом.

Примером этого случая может служить расположение осажденных атомов серы на плоскости (100) железа Fe, которое обозначается Fe(100) $P(2 \times 2)$ -S.

Аналогично, если адатомы занимают центрирующие позиции, как показывает рисунок, то подобная конфигурация обозначается C(2×2), где C - центрированная элементарная ячейка.



Матричное представление примитивной ячейки, обозначенной штриховой линией

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Примитивная ячейка покрытия повернута на угол 45° и ее размер в $\sqrt{2}$

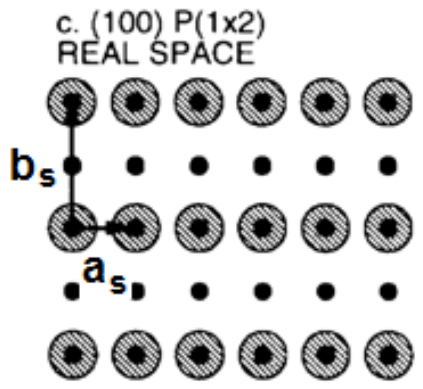
раз больше ячейки подложки. Ее обозначение $\sqrt{2} \times \sqrt{2} R45^\circ$

, где R обозначает поворот.

$$\begin{aligned} a_s &= G_{11}a + G_{12}b \\ b_s &= G_{21}a + G_{22}b \end{aligned} \quad G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

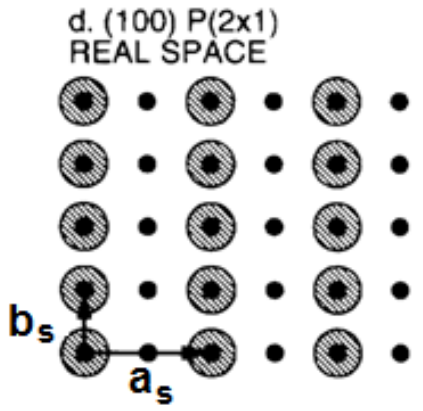
$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b| \quad X(hkl)_{m \times n} - R\varphi^\circ$$

$\mathbf{a}_s, \mathbf{b}_s$ – векторы трансляций суперструктуры и \mathbf{a}, \mathbf{b} - векторы трансляций плоскости ПОДЛОЖКИ



Матричная запись $G = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Запись Вуда: $P(1 \times 2)$



Матричная запись $G = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Запись Вуда: $P(2 \times 1)$

$$\begin{aligned} a_s &= G_{11}a + G_{12}b \\ b_s &= G_{21}a + G_{22}b \end{aligned}$$

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

$$|a_s| = m|a|, \quad |b_s| = n|b|$$

$$X(hkl)m \times n - R\varphi^\circ$$

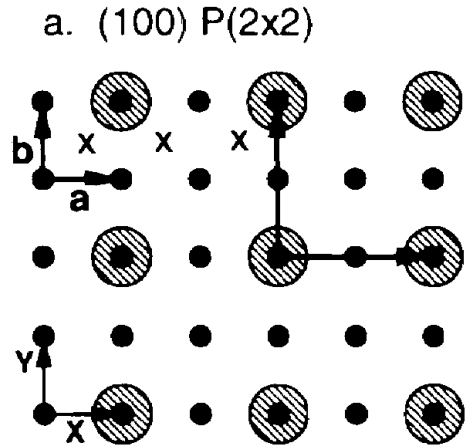
Мы рассмотрели только лишь случаи, когда адатомы расположены непосредственно над атомами подложки.

Адатомы могут располагаться и между позициями атомов подложки.

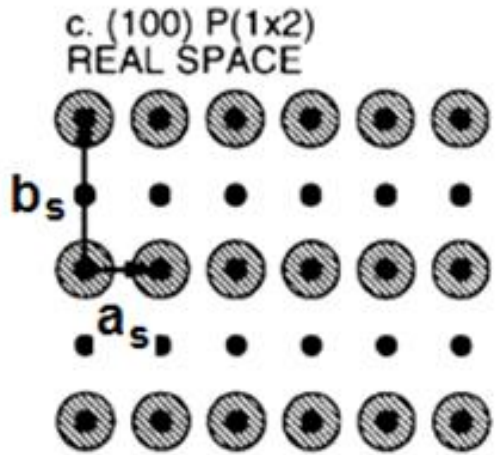
Например, это произойдет, если каждый атом сместить на $\frac{1}{2}a$ и $\frac{1}{2}b$

С учетом того, что операции с векторами не зависят от выбора начала отсчета, подобные слои обозначаются, как и ранее, т.е.

$P(2 \times 2)$,



$P(1 \times 2)$.



Дефекты в кристаллах

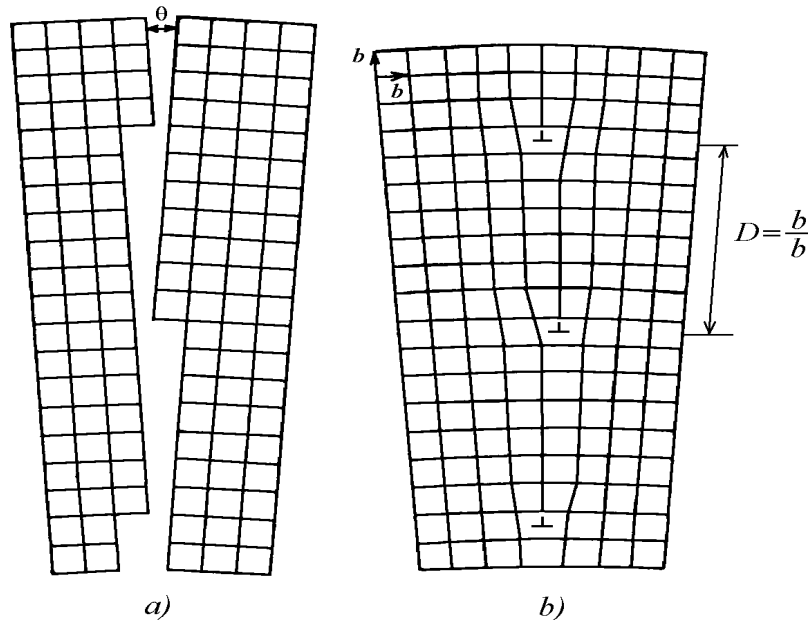
Выделяют четыре класса дефектов:

точечные или **атомные** дефекты (нульмерные);

линейные дефекты (одномерные): дислокации;

поверхностные дефекты (двумерные): границы зерен ;

объемные дефекты (трехмерные).

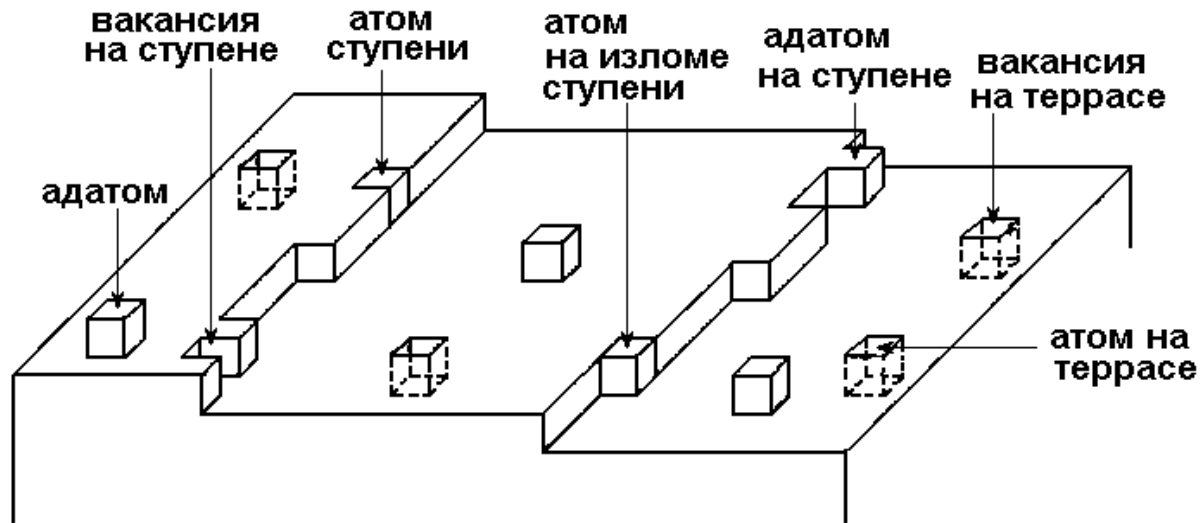


В теории дислокации доказывается:

- 1) нет других физически реальных путей соединения разориентированных зерен, кроме образования расположенных в ряд дислокации;
- 2) дислокации этого ряда являются линейными, параллельными общей оси куба для двух зерен

Точечные дефекты поверхности

Дефекты поверхности схематически иллюстрируются с помощью модели террас-ступеней-изломов (ТСИ) (*terrace-step-kink*, TSK). Модель ТСИ, показывает типичные атомные положения и дефекты на поверхности



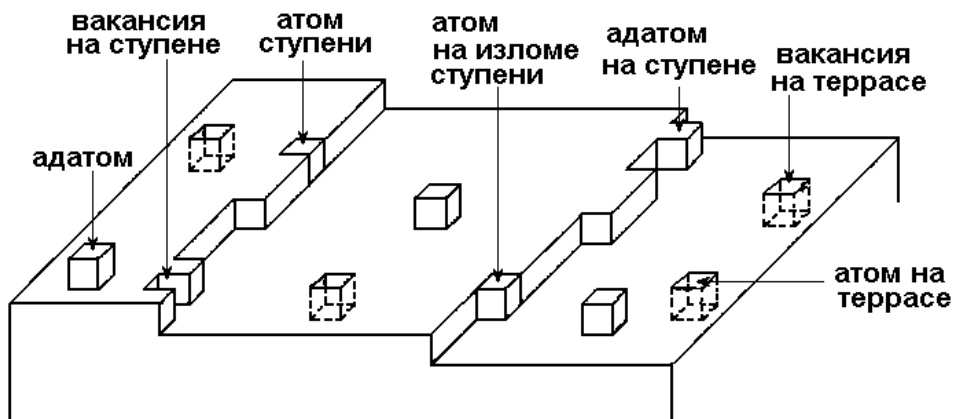
изломы, адатомы, вакансии и точки выхода дислокаций на террасах и ступенях, а также дефекты атомного замещения на поверхности соединений

Коллективное действие поверхностных дефектов меняет структуру поверхности.

Например, оплавление поверхности можно рассматривать как процесс дефектообразования, в который вовлечены почти все атомы поверхности.

Даже в малых концентрациях дефекты играют решающую роль процессах, протекающих на поверхности.

Согласно модели ТСИ, точечные дефекты могут быть подразделены на два типа: кинетически стабильные дефекты и термодинамически стабильные дефекты.



Кинетически стабильные дефекты - это точки выхода дислокаций на поверхности.

Термодинамически стабильные точечные дефекты, это адатомы и вакансии на террасах, а также изломы, адатомы и вакансии на ступенях.

Энергия образования адатома

$$\Delta E_a = E_a - E_c ,$$

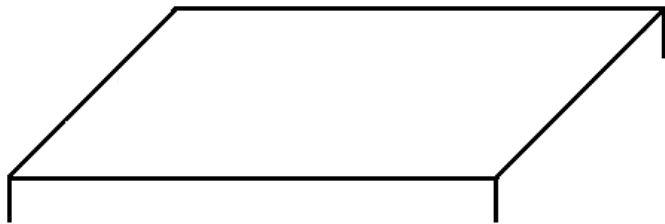
E_a и E_c - энергия связи атома в положениях излома и адатома

Равновесная концентрация адатомов

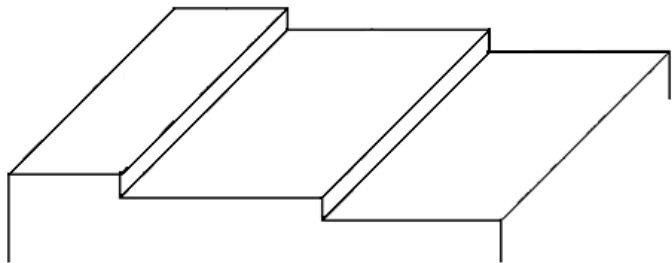
$$n_a = n_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_a}{k_B T}\right),$$

Атом в изломе на ступени имеет число связей, равное половине числа связей атома в объеме кристалла. Энергия атома в изломе равна половине энергии атома в объеме. Энергия сублимации кристалла также равна половине энергии атома в объеме.

Ступени, сингулярные и вицинальные поверхности. Атомарно гладкие поверхности называются *сингулярными поверхностями*. Поверхности, которые образуют малый угол θ с сингулярной поверхностью, называются *вицинальными поверхностями*.



Модель сингулярной поверхности



Модель вицинальной поверхности

Поверхностная энергия кристалла, которую также называют *поверхностным натяжением* по аналогии с жидкостями, - это работа, которую надо совершить для создания поверхности кристалла единичной площади.

При $T = 0$ К поверхностная энергия приблизительно равна полусумме энергий всех межатомных связей, которые надо разорвать, чтобы получить данную поверхность.

Адатомы могут быть *внешними* или *термическими*.

Вакансии имеют термическое происхождение.

Дефекты замещения на поверхности – атомы поверхностной фазы.

Дислокации.

Доменные границы. Область поверхности, занятая данной поверхностной фазой, называемая доменом поверхностной фазы. Обычно терраса состоит из нескольких доменов, разделенных доменными границами (доменными стенками).

Пленку, имеющую ГЦК решетку, осадили на (100) плоскость монокристалла с ГЦК решеткой. Угол между [100] направлениями пленки и подложки оказался равным $63,4^\circ$.
Определить индексы Миллера плоскости поверхности пленки.