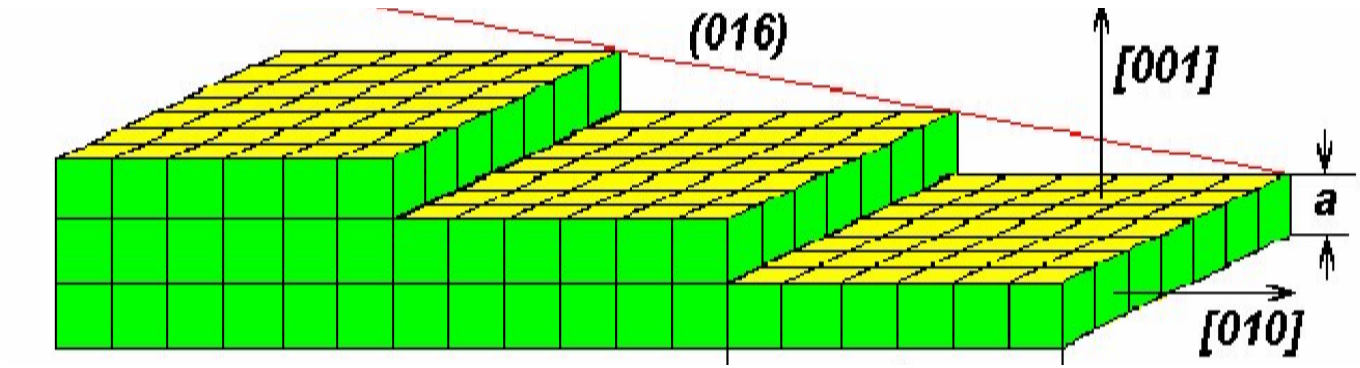
2.2. Обозначения поверхностей монокристаллов и атомных структур

Поверхности монокристаллов принято обозначать индексами Миллера, соответствующими плоскости, параллельной поверхности

Расположение атомов на грани *(001)* кристалла, имеющего гранецентрированную кубическую структуру, очевидно



Саморджаем предложено обозначать такие поверхности следующим образом:

Объем.струк.(S) [m(001)xn(010)]

(S) указывает на ступенчатое строение грани. В квадратных скобках *m* - ширина террасы, ее ориентация, высота (*n*) и ориентация ступени.

Часто структура поверхностного слоя отличается от объемной.

Часто структура поверхностного слоя отличается от объемной.

Ячейка поверхностной решетки имеет большие размеры.

Это не означает, что не могут быть меньше расстояния между атомами.

Такие решетки называют **сверхрешетками**

Основные вектора трансляции

в объеме $\vec{T}_x, \vec{T}_y$

на поверхности $\vec{t}_x, \vec{t}_y$

.

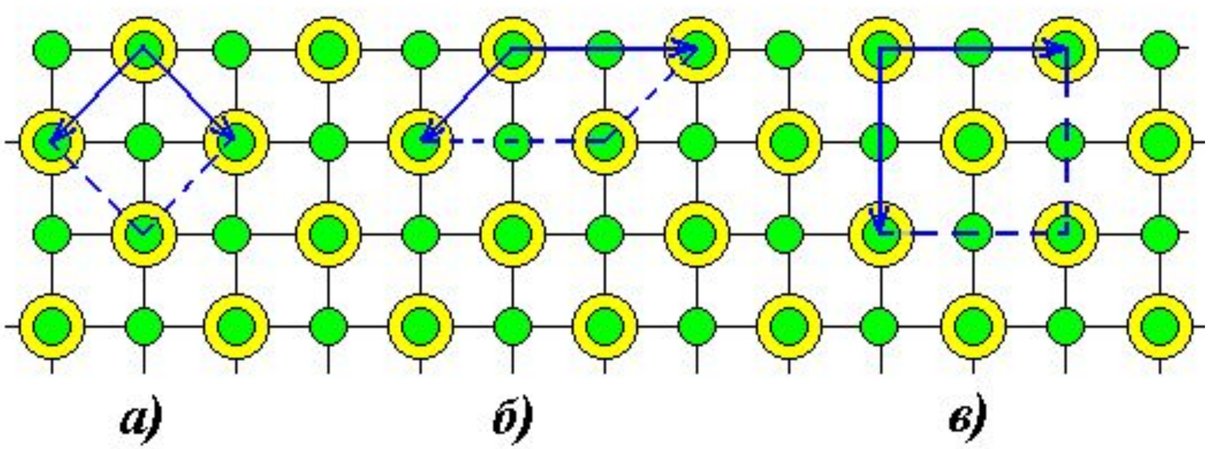
Могут быть связаны друг с другом при помощи матрицы **M**:

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

$$\vec{t}_x = m_{11}\vec{T}_x + m_{12}\vec{T}_y$$

$$\vec{t}_y = m_{21}\vec{T}_x + m_{22}\vec{T}_y$$

Матричная запись используется редко



$$M_a = \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ +1 & +1 \end{pmatrix}; \qquad M_b = \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ 0 & +2 \end{pmatrix}; \qquad M_c = \begin{pmatrix} +2 & 0 \\ 0 & +2 \end{pmatrix}$$

$$\vec{t}_x \times \vec{t}_y = \left(m_{11}\vec{T}_x + m_{12}\vec{T}_y\right)\times\left(m_{21}\vec{T}_x + m_{22}\vec{T}_y\right) = m_{12}\cdot m_{21}\left(\vec{T}_y \times \vec{T}_x\right) + m_{11}\cdot m_{22}\left(\vec{T}_x \times \vec{T}_y\right) =$$
$$= m_{11}\cdot m_{22}\left(\vec{T}_x \times \vec{T}_y\right) - m_{12}\cdot m_{21}\left(\vec{T}_x \times \vec{T}_y\right) = \det\|M\|\cdot\left(\vec{T}_x \times \vec{T}_y\right)$$

Матричная запись используется редко

Обычно используется обозначение, предложенное Вудом

Обычно используется обозначение, предложенное Вудом

Обязательное условие → Углы между основными векторами трансляций в объеме и на поверхности одинаковы

Можно ввести два числа

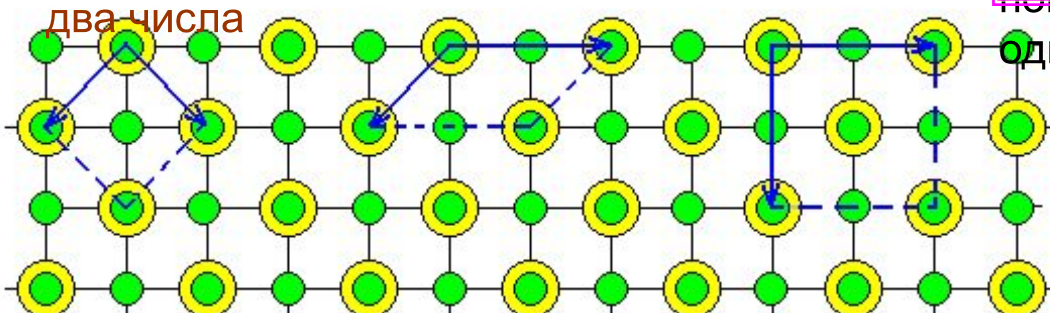
$$m = \frac{|\vec{t}_x|}{|\vec{T}_x|}; \qquad n = \frac{|\vec{t}_y|}{|\vec{T}_y|}$$

Углы между основными векторами трансляций в объеме и на поверхности одинаковы

Если не известно строение ячейки → $(m x n)$-$R\alpha^0$

Обычно используется обозначение, предложенное Вудом → $c(m x n)$-$R\alpha^0$

Можно ввести два числа

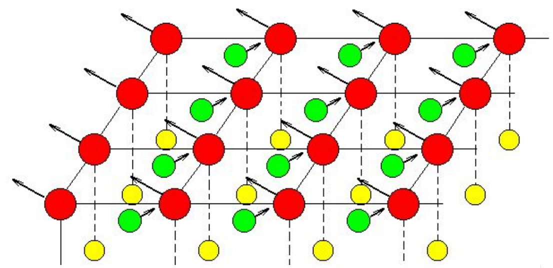


$p(\sqrt{2}x\sqrt{2}) - R45^0$, c(2x2).

На поверхности

Релаксация

Реконструкция



Релаксация - смещение атомов
без изменения симметрии

Реконструкция - взаимное
расположение частиц в
поверхностном слое кардинально
отличается от имеющегося в объеме,
изменяется
симметрия решетки