

2.4. Релаксация неполярных поверхностей ионных кристаллов

Поверхности двух типов



полярные и неполярные

Полярные поверхности



Плоскость, параллельная поверхности содержит не одинаковое число катионов и анионов, имеет не скомпенсированный заряд

Неполярные поверхности -

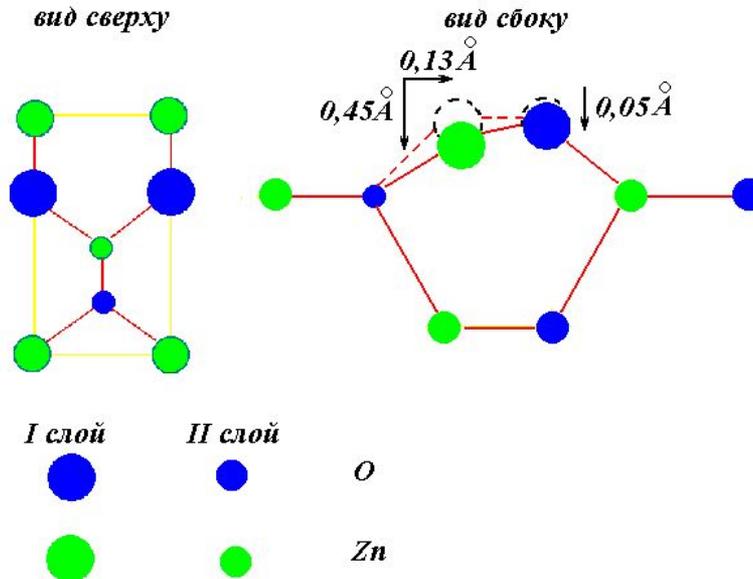


Заряд равен нулю
(NaCl (100) или MgO (100), GaAs (110))



Структура (1x1).

Смещение поверхностного слоя в объем твердого тела, атомы разного сорта смещаются на разную величину



В случае щелочногалоидных кристаллов можно опираться на теоретические оценки

В случае щелочногалоидных кристаллов можно опираться на теоретические оценки

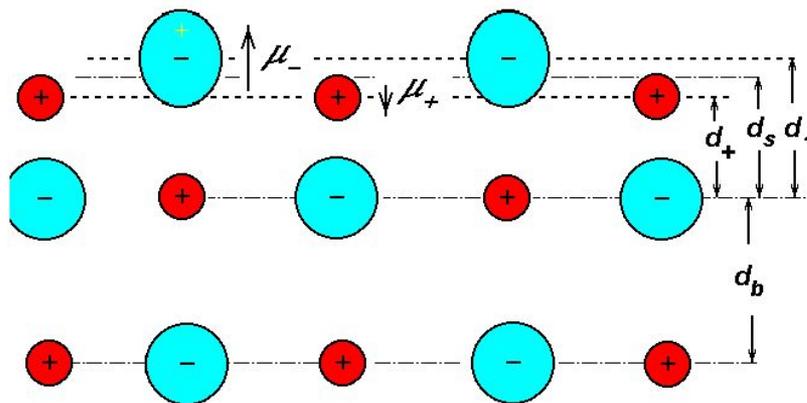


Взаимодействие ионов может быть описано используя закон Кулона.

Потенциал в любой внешней по отношению к данной пластине точке экспоненциально затухает по мере удаления от нее:

$$U(z) \sim \exp(-2\pi a/z).$$

Вклад даже ближайших пластин не превышает 10% от общей величины потенциала



Ионы на поверхности – в асимметричном поле

Средняя поверхностная плоскость

$$d_s = \frac{d_- + d_+}{2},$$

смещена в сторону объема

Происходит “взъерошивание” поверхности - анионы меньше смещаются в сторону объема, чем катионы

Важна поляризация ионов

«Жесткость» электронных оболочек катионов больше



Поляризуемость катионов меньше по сравнению с поляризуемостью анионов



Неодинаковое смещение ионов разного знака

$|d_- - d_+|$, возрастает с увеличением разности поляризуемости ионов $|\alpha_- - \alpha_+|$

Имеет значение и структура связей в образце



Есть релаксация



Нет релаксации

Различие - в количестве связей между плоскостями, параллельными поверхности.

Одна связь на катион вдоль поверхностного слоя, две связи со следующим слоем.

Две связи на катион вдоль поверхностного слоя, одна связь со следующим слоем.