

2.7. Фасетирование поверхности

Не только релаксация
и реконструкция

Причина

Поверхностная энергия



Изменение кристаллографической
ориентации на отдельных участках

Зависит от кристаллографической
ориентации, выше у более рыхлых граней

Проволоки, имеющие правильную цилиндрическую форму, после прогрева перекристаллизуются так, чтобы на поверхность были плотноупакованные грани

Проигрыш в энергии
за счет увеличения
площади поверхности



Выигрыш вследствие различия удельных
поверхностных энергий.

Итог – появление участков с
различной кристаллографической
ориентацией.



Фасетирование поверхности.

Наблюдается на монокристаллических поверхностях

Наблюдается на монокристаллических поверхностях

$Ge(110)$:



при повышенных температурах на поверхности фasetки из других граней (микрогранка)

“Благополучная” грань (011) золота

Расположение рефлексов на дифракционной картине соответствует структуре (2×1) .

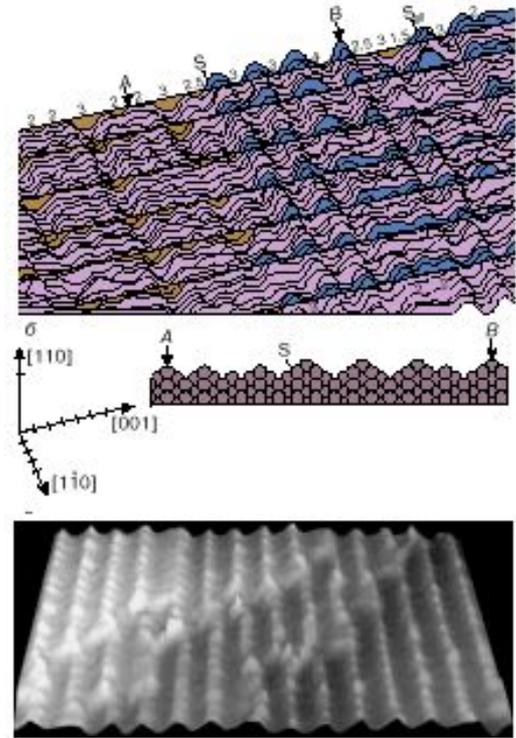
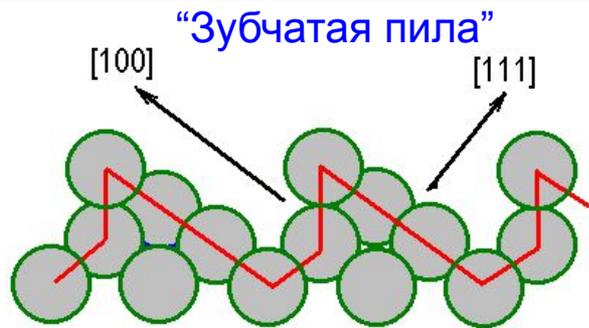
Взъерошивание, гофрировка, модель пропущенных рядов

Вычисления, привели к противоречивым результатам

- Эксперименты по рассеянию ионов гелия показали, что она обладает значительно большей шероховатостью, чем предсказывается моделью пропущенных рядов
- Необходимы значительно большие времена для перехода от структуры (1×1) к структуре (2×1) , чем это наблюдается на эксперименте

Для реконструкции атомы должны мигрировать на несколько сот ангстрем (от 200 до 2000 Å)

У (2x1) шероховатость 0,45 Å,
в случае структуры (3x1) - 1,4 Å.



Сканирующая туннельная микроскопия

Ленточная структура

Холмы вдоль [110] на сотни Å, разделены на расстояние ~8 Å, т.е. структура (2x1).

Часто ленты отделяются друг от друга ступенями и каналами, что ~ (3x1) и даже (4x1).

Au (011) \Longrightarrow на самом деле набор ленточных фасеток грани (111) шириной, равной 2-3 атомным рядам,

На стенках каналов - структура грани (111)

Объясняет наблюдаемую по рассеянию ионов повышенную шероховатость.



У (2x1) шероховатость 0,45 Å,
в случае структуры (3x1) - 1,4 Å.

$Si(100)$ - наряду с (2×1) имеются места с $p(2 \times 1)$ и $s(2 \times 1)$

$Si(100)$ - наряду с (2×1) имеются места с $p(2 \times 1)$ и $s(2 \times 1)$

Часто поверхность не равновесна

Ступенчатые грани Pt , образованных срезом под углом к граням (111) или (001)

По расчетам	Минимальную γ имеют только плоскости с низкими индексами.	Грани, соответствующие другим направлениям, в том числе ступенчатые, не стабильны,
-------------	--	--

По ДМЭ - у Pt ступенчатые грани не исчезают даже при отжиге выше 700 K

Устойчивость объясняется затрудненностью путей перестройки

Механизмы:	<ul style="list-style-type: none">• поверхностная диффузия• термическая десорбция• объемная диффузия	Требуется значительная энергия, необходимо большое время
------------	--	--

Зачастую имеют дело с поверхностями не достигшими равновесного состояния

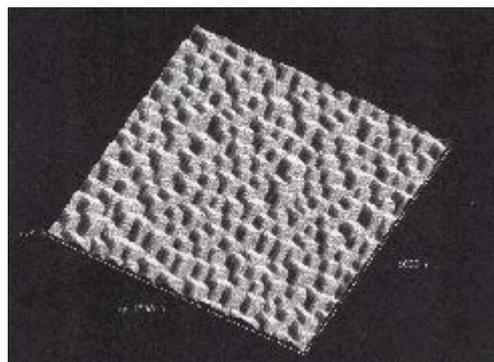
Фасетирование может стимулироваться адсорбцией

Фасетирование может стимулироваться адсорбцией

(111) W или Mo + моноатомная пленка Rh, Pd, Ir, Pt, Au, O или Cl.



Пирамиды с огранкой гранями {211}



Почему не гранями {110}, имеющими наименьшую поверхностную энергию

Фасетирование гранями {211} увеличивает площадь на 6%

При огранке {110} площадь должна возрасти на 22%.

W(111), на которую нанесена моноатомная пленка Pd, после отжига при 1075 K

Фасетирование не происходит при адсорбции CO, Ti, Gd, Ni, Cu, Ag.



Важна электронная структура.

Фасетируют адсорбаты с электроотрицательностью $>2,0$

Не фасетируют адсорбаты с электроотрицательностью $<2,0$

Аналогично на поверхности Ge(103) при адсорбции сурьмы

Аналогично на поверхности Ge(103) при адсорбции сурьмы

После кратковременного (5 мин) отжига при 800 K поверхность разбивается на пирамиды высотой $\sim 10 \text{ \AA}$ и шириной $\sim 80 \text{ \AA}$ с ориентацией граней {113}. Более длительный отжиг (20 мин) приводит к объединению пирамид в ленты зубчатой формы длиной 2000 \AA . Их ширина $\sim 170 \text{ \AA}$, а высота $\sim 20 \text{ \AA}$.

В некоторых случаях микрогранка может быть не стабильной и иметь место только при повышенных температурах.