2.10.Колебания поверхностных атомов

При повышении температуры появляются колебания атомов около их равновесных положений

Силы взаимодействия можно рассматривать как квазиупругие

$$u = A\cos(\omega t - \vec{q}\vec{r})$$

ω - *частота колебаний*

$\vec{q}$ *– волновой вектор*

Принимает дискретные значения в интервале от $от\ -\frac{\pi}{a}\quad до\ +\frac{\pi}{a}$

Амплитуда колебаний *A* тем больше, чем выше температура.

Колебания можно охарактеризовать средним квадратом амплитуды или среднеквадратичным смещением (СКС) атомов

$\langle u^2\rangle = A^2/2.$

Приближение Дебая

Приближение Дебая

$$\omega_D = q_D v_{зв}$$

$$\omega_D^3 = \frac{6\pi^2 v_{звук}^3 N}{L^3}$$

$$< u^2 > = \frac{1}{N}\int_0^{\omega_D} < u_\omega^2 > D(\omega)d\omega$$

$$\left(D(\omega) = \frac{dn(\omega)}{d\omega} = V\frac{\omega^2}{2\pi^2 v_{звук}^3} = 3N\frac{\omega^2}{\omega_D^3} \right)$$

$$\bar{\varepsilon}_\omega = \bar{\varepsilon}_\omega^{kin} + \bar{\varepsilon}_\omega^{pot} = 2\bar{\varepsilon}_\omega^{pot} = M\omega^2 < u_\omega^2 >$$

$$\bar{\varepsilon}_\omega = \hbar\omega\left(\frac{1}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\boxed{\left\langle u_\omega^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{M\omega}\left(\frac{1}{\left[exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]} + \frac{1}{2} \right)}$$

$$< u^2 > = \frac{1}{N}\int_0^{\omega_D} \frac{\hbar}{M\omega}\left\{ \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} + \frac{1}{2} \right\} * 3N\frac{\omega^2}{\omega_D^3}d\omega = \frac{3\hbar}{M\omega_D^3}\int_0^{\omega_D} \omega\left\{ \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} + \frac{1}{2} \right\}d\omega$$

Экспоненту в знаменателе можно разложить в ряд.
Пренебрегая 1/2, получаем

$$< u^2 > = \frac{3\hbar}{M\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\omega\left\{\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1}+\frac{1}{2}\right\}d\omega$$

$$\boxed{kT > \hbar\omega_D}$$

Экспоненту в знаменателе можно разложить в ряд.
Пренебрегая 1/2, получаем

$$\Rightarrow \quad \boxed{< u^2 > = \frac{3kT}{M\omega_D^2}}$$

Дебаевская частота связана с постоянной квазиупругой силы β: $\quad \omega_D \sim \sqrt{\beta/M}$

в частном случае гармонического осциллятора равенство

$$\boxed{< u^2 > \sim \frac{3kT}{\beta}} \quad \Rightarrow$$

СКС прямо пропорционально температуре
и не зависит от массы атомов

Характеристическая
дебаевская температура

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k}$$

$$< u^2 > = \frac{3\hbar^2}{Mk\theta_D^2}T$$

Тепловые колебания уменьшают порядок, Следствие - уменьшение интенсивности дифракционных пучков.

$$\boxed{kT < \hbar\omega_D}$$

Главным членом является ½.

$$< u^2 > = \frac{3\hbar}{4M\omega_D} = \frac{3\hbar}{4\sqrt{M\beta}} = \frac{3\hbar^2}{4Mk\theta_D}$$

$$< u^2 > = \frac{3\hbar}{M\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\omega\left\{\frac{1}{exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1}+\frac{1}{2}\right\}d\omega$$

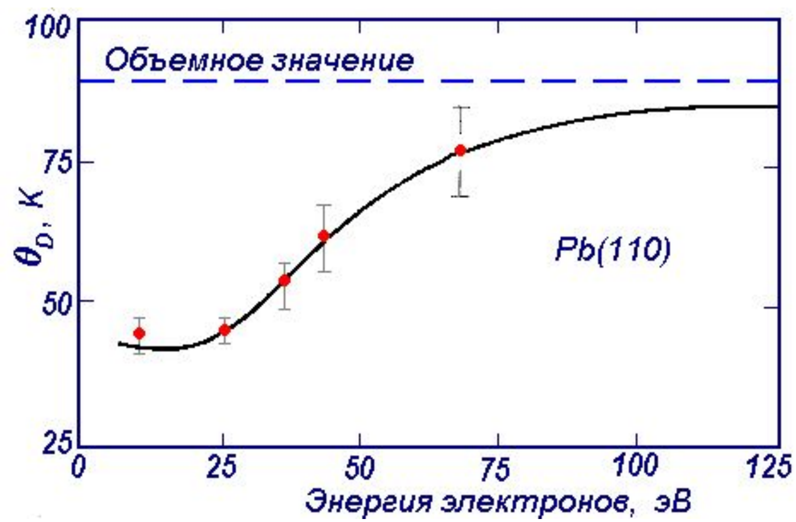
Не зависит от T, определяется величиной упругой постоянной β и массой

Зависят от характера и величины связи

На поверхности уменьшение соседей, релаксация и/или реконструкция

Экспериментально

ДМЭ



Тепловые колебания уменьшают порядок, Следствие - уменьшение интенсивности дифракционных пучков.

Измеряется усредненная по глубине величина.

4,2

$$\vec{u} = \vec{u}_{\perp} + u_{\|}$$

По разному влияют на
 интенсивность
дифракционных пучков в
зависимости
от угла рассеяния
электронов.

Поверхность	$<u_{\perp}^{2}>/<u_{b}^{2}>$	$<u_{II}^{2}>/<u_{b}^{2}>$
Si(111)-(7x7)	*2.2*	*1*
Si(111)-(2x1)	*2.6÷3.8*	
Si(100)-(2x1)	*5.2*	*5.2*
Si(110)-(2x1)	*3.5*	*3.5*
GaAs(110)-(1x1)	*1.5*	*1.5-1*
GaAs(100)-(2x8)	*4*	*4*
Ge(111)-(2x8)	*4*	*4*
Ni(110)	*1,6*	
Pb(111)	*4,2*	
Pt(110)	*4,8*	
Cu(111)	*1,9*	
Ir(100)	*1,8*	

Термическое расширение

Следствие ангармонизма сил

$$\boxed{F=-\beta x+\gamma x^2}$$

Потенциальная энергия:

$$U=-\int_0^x F dx=\frac{1}{2}\beta x^2-\frac{1}{3}\gamma x^3$$

Вероятность отклонения атома от равновесного положения по статистике Больцмана:

$$P(x)=A\,exp\left(-\frac{U}{kT}\right)=A\,exp\left(-\frac{\beta x^2}{2kT}+\gamma\frac{x^3}{3kT}\right)$$

Пусть $\frac{1}{3}\gamma x^3 << kT$

$$P(x)\approx A\exp\left(-\frac{\beta x^2}{2kT}\right)\left(1+\gamma\frac{x^3}{3kT}\right)$$

Постоянная *A* из условия

$$\int P(x)dx=1$$

$$1=A\int_{-\infty}^{+\infty} exp\left(-\frac{\beta x^2}{2kT}\right)\left(1+\gamma\frac{x^3}{3kT}\right)dx=A\cdot 2\cdot\int_0^{+\infty} exp\left(-\frac{\beta x^2}{2kT}\right)dx=A\cdot 2\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\beta/2kT}}$$

$$\boxed{A=\left(\frac{\beta}{2\pi kT}\right)^{1/2}}$$

$$\bar{x}=\int xP(x)dx=\left(\frac{\beta}{2\pi kT}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{\beta x^2}{2kT}\right)\left[x+\frac{\gamma x^4}{3kT}\right]dx=\frac{\gamma kT}{\beta^2}$$

Коэффициент термического расширения

$$\boxed{\bar{x} = \frac{\gamma k T}{\beta^2}}$$

При $\gamma = 0$ $\rightarrow$ равно нулю

Коэффициент термического расширения

$$\boxed{\alpha = \frac{\bar{x}}{a}\frac{1}{T} = \frac{\gamma k}{a\beta^2}}$$

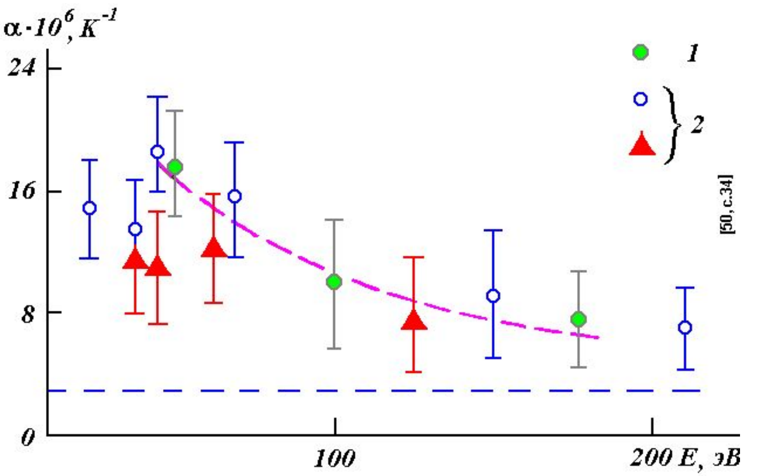
Увеличение СКС на поверхности - свидетельство уменьшения коэффициента упругости β.

$\Rightarrow$ На поверхности α больше

Для вычислений нужен закон взаимодействия частиц

Для потенциала Морзе

$$\frac{\alpha_s}{\alpha_b} \approx \frac{3}{4}\left(\frac{\langle u_s^2 \rangle}{\langle u_b^2 \rangle}\right)$$



Si(110). 1 - $\alpha_{||}$ 2 - $\alpha_{\perp}$

Экспериментально $\Rightarrow$ ДМЭ

Повышенная α на поверхности

Повышенная α на поверхности

Напряжения в поверхностном слое $\Rightarrow$ Изменение атомного строения поверхности

Могут быть снижены - гофрировка, генерация вакансий и междоузельных атомов, даже разупорядочение

Облегчается наличием выступов, ступеней, изломов.

Ангармонизм колебаний $\Rightarrow$ Тепловое сопротивление χ.

$$\chi \sim \frac{\beta^{7/2}}{\gamma^2 T} \qquad \boxed{\alpha = \frac{\gamma k}{a\beta^2}} \qquad \chi \sim \frac{1}{\alpha^2\sqrt{\beta T}}$$

На поверхности - увеличение сопротивления передачи тепла.

$$\frac{\chi_s}{\chi_b} = \left(\frac{\alpha_b}{\alpha_s}\right)^2 \sqrt{\frac{\beta_b}{\beta_s}} = \left(\frac{\alpha_b}{\alpha_s}\right)^2 \left(\frac{\langle u_s^2\rangle}{\langle u_b^2\rangle}\right)^{1/2} = (0.25)^2 (1.5\ldots2)^{1/2} \approx \frac{1}{1.5}$$

. Обрыв решетки должен приводить к усилению рассеяния фононов