

2.10. Колебания поверхностных атомов

При повышении температуры появляются колебания атомов около их равновесных положений

Силы взаимодействия можно рассматривать как квазиупругие

$$u = A \cos(\omega t - \overset{\text{ш}}{\underset{\text{ш}}{q}} r)$$

ω - частота колебаний

$\overset{\text{ш}}{\underset{\text{ш}}{q}}$ - волновой вектор

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

$$\omega_D = q_D v_{3\text{вук}}$$

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

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

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

$$\bar{\varepsilon}_\omega = \bar{\varepsilon}_\omega^{\text{kin}} + \bar{\varepsilon}_\omega^{\text{pot}} = 2\bar{\varepsilon}_\omega^{\text{pot}} = M\omega^2 \langle u_\omega^2 \rangle$$

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

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

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

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

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

$$kT > \hbar\omega_D$$

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

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3kT}{M\omega_D^2}$$

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

в частном случае гармонического осциллятора равенство

$$\langle u^2 \rangle \sim \frac{3kT}{\beta}$$

СКС прямо пропорционально температуре
 и не зависит от массы атомов

Характеристическая
 дебаевская температура

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

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{Mk\theta_D^2} T$$

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

$$kT < \hbar \omega_D$$

Главным членом является $\frac{1}{2}$.

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

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

На поверхности уменьшение соседей,
релаксация и/или реконструкция

Экспериментально

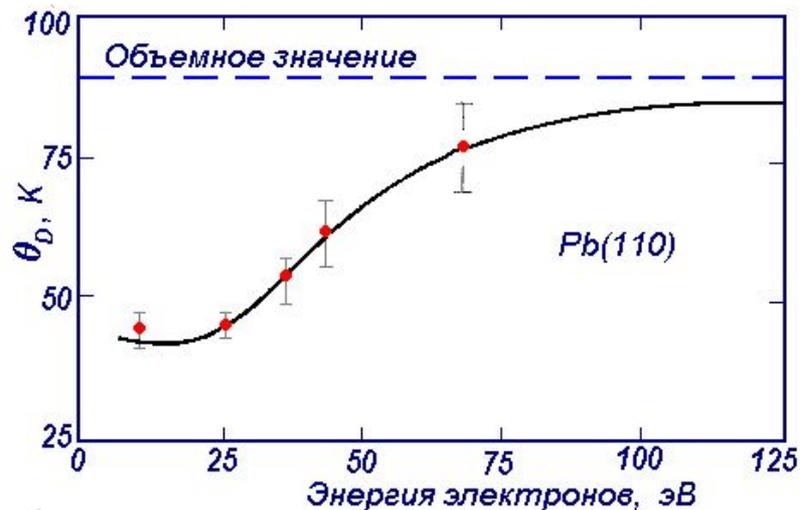
ДМЭ

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

Измеряется усредненная по глубине
величина.

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

Зависят от характера
и величины связи



$$\bar{u} = \bar{u}_{\perp} + u_{\parallel}$$

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

Поверхность	$\langle u_{\perp}^2 \rangle / \langle u_b^2 \rangle$	$\langle u_{\parallel}^2 \rangle / \langle u_b^2 \rangle$
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

$$F = -\beta x + \gamma x^2$$

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 $\frac{1}{3} \gamma x^3 \ll kT$



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

Постоянная A из условия



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

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

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

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

Коэффициент термического расширения

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

При $\gamma = 0 \rightarrow$ равно нулю

Коэффициент термического расширения

Увеличение СКС на поверхности - свидетельство уменьшения коэффициента упругости β .

Для вычислений нужен закон взаимодействия частиц

Для потенциала Морзе

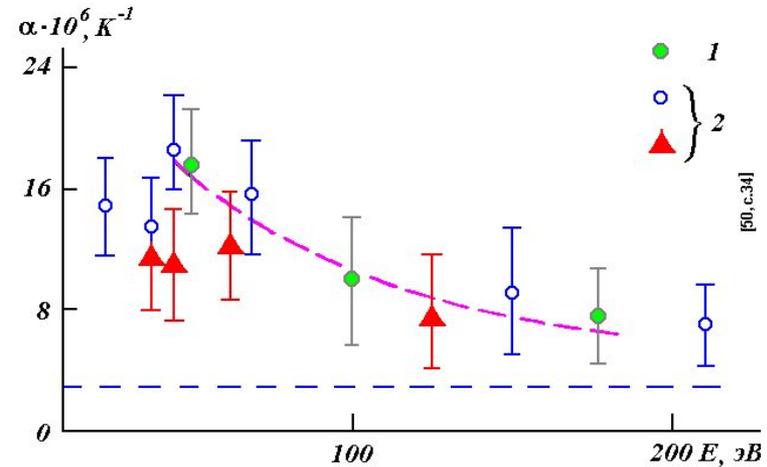
$$\frac{\alpha_s}{\alpha_b} \approx \frac{3}{4} \left(\frac{\langle u_s^2 \rangle}{\langle u_b^2 \rangle} \right)$$

Экспериментально \Rightarrow ДМЭ

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



На поверхности α больше

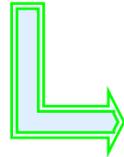


Si(110). 1 - α_{\parallel} 2 - α_{\perp}

Повышенная α на поверхности

Повышенная α на поверхности

Напряжения
в поверхностном слое



Изменение атомного
строения поверхности

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

Облегчается наличием выступов, ступеней, изломов.

Ангармонизм колебаний



Тепловое сопротивление χ .

$$\chi \sim \frac{\beta^{7/2}}{\gamma^2 T}$$

$$\alpha = \frac{\gamma k}{a \beta^2}$$

$$\chi \sim \frac{1}{\alpha^2 \sqrt{\beta T}}$$

На поверхности - увеличение сопротивления передачи тепла.

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

. Обрыв решетки должен приводить к усилению рассеяния фононов