

Г. Г. Владимиров

ФИЗИКА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ



Г. Г. ВЛАДИМИРОВ

ФИЗИКА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

РЕКОМЕНДОВАНО

*Ученым советом Санкт-Петербургского
государственного университета в качестве учебного пособия
для студентов направлений подготовки «Физика»,
«Прикладные математика и физика»,
«Радиофизика»*



**САНКТ-ПЕТЕРБУРГ · МОСКВА · КРАСНОДАР
2021**

ББК 22.37я73

В 57

Владимиров Г. Г.

В 57 Физика поверхности твердых тел: Учебное пособие. — СПб.: Издательство «Лань», 2021. — 352 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература).

ISBN 978-5-8114-1997-5

В пособии рассматриваются особенности физико-химических свойств, возникающих вследствие образования поверхности. Приводятся данные по термодинамике поверхности и равновесной структуре кристаллов. Подробно рассматриваются изменения атомной структуры на поверхности — релаксация, реконструкция, фасетирование, а также механизмы, отвечающие за структурную перестройку. Большое внимание уделено трансформации электронной структуры — причинам возникновения поверхностных состояний и особенностям поверхностной зоны Бриллюэна. Рассмотрены кинетика адсорбции, анализируются силы, приводящие к физической и химической адсорбции, электронная структура адсорбирующихся частиц, их связь с поверхностью, поверхностная диффузия и реакции на поверхности. Представлены механизмы роста тонких пленок и особенности проводимости в них.

Учебное пособие предназначено для студентов, обучающихся по направлениям подготовки «Физика», «Прикладная математика и физика», «Радиофизика» и другим физико-математическим и техническим направлениям, а также для аспирантов, соискателей и научных сотрудников, специализирующихся в области физики и химии поверхности, физики наноструктур.

ББК 22.37я73

Рецензенты:

В. Ф. АГЕКЯН — доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой физики твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета; **А. С. ШУЛАКОВ** — доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой электроники твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета.

Обложка

Е. А. ВЛАСОВА

*Охраняется законом РФ об авторском праве.
Воспроизведение всей книги или любой ее части
запрещается без письменного разрешения издателя.
Любые попытки нарушения закона
будут преследоваться в судебном порядке.*

© Издательство «Лань», 2021

© Г. Г. Владимиров, 2021

© Издательство «Лань»,

художественное оформление, 2021



ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
<i>Глава первая</i>	
Введение	7
1.1. Значение исследований поверхности	7
1.2. Методы получения чистой поверхности	14
1.2.1. Прогрев при высоких температурах	15
1.2.2. Химические методы очистки	17
1.2.3. Ионная бомбардировка	18
1.2.4. Раскалывание в сверхвысоком вакууме	20
1.2.5. Некоторые специфические методы	21
<i>Глава вторая</i>	
Поверхностная энергия и равновесная форма кристаллов	23
2.1. Термодинамика поверхности	23
2.2. Анизотропия поверхностной энергии	27
<i>Глава третья</i>	
Атомная структура чистых поверхностей	36
3.1. Двумерная кристаллическая решетка	38
3.2. Обозначения поверхностей монокристаллов и атомных структур	45
3.3. Изменение межплоскостных расстояний у поверхности	49
3.4. Релаксация неполярных поверхностей ионных кристаллов	58
3.5. Реконструкция поверхности	62
3.5.1. Реконструкция на поверхности тугоплавких металлов	65
3.5.2. Платина, золото (001)	68
3.6. Реконструкция на поверхности полупроводников	74
3.6.1. Кремний (100)	76
3.6.2. Кремний (111)	84
3.7. Дефекты на поверхности	78
3.7.1. Нульмерные дефекты	84
3.7.2. Одномерные дефекты. Ступени	89
3.8. Фасетирование поверхности	92
3.9. Колебания поверхностных атомов	96
3.9.1. Волны на поверхности	96

3.9.2. Среднеквадратичное смещение атомов	102
3.9.3. Влияние ангармонизма сил	105
3.9.4. Плавление	109
3.10. Структура поверхности и ее физические свойства	111

Глава четвертая

Электронные свойства поверхности твердого тела	117
4.1. Модельные представления потенциала на поверхности	117
4.2. Поверхностные состояния. Метод ЛКАО	121
4.3. Поверхностные состояния Шокли	126
4.4. Поверхностные состояния. Приближение почти свободных электронов	128
4.5. Поверхностные состояния, связанные с силами зеркального изображения	136
4.6. О возможности изменения ширины запрещенной зоны на поверхности	139
4.7. Поверхностная (проектированная) зона Бриллюэна	142
4.8. Экспериментальное исследование электронной структуры поверхности	151
4.9. Изменение потенциала и распределение электронной плотности у поверхности	158
4.9.1. Желе-модель металла	158
4.9.2. Метод функционала плотности	160
4.9.2.1. Электронный газ с почти постоянной плотностью	162
4.9.2.2. Плавно меняющаяся электронная плотность	163
4.9.3. Способы реализации метода функционала плотности	166
4.9.3.1. Расширенный метод Томаса — Ферми	166
4.9.3.2. Усовершенствованный метод Хартри	168
4.9.3.3. Вариационный метод	169
4.9.4. Электронная плотность и потенциал у поверхности	169
4.9.5. Работа выхода	173
4.9.6. Поверхностная энергия	175
4.9.7. Учет атомной структуры поверхности	177
4.9.8. Взаимодействие заряда с поверхностью	179
4.9.9. Влияние внешнего электрического поля	182

Глава пятая

Адсорбция	184
5.1. Общие сведения	184
5.2. Кинетика адсорбции. Теория Ленгмюра	189
5.3. Полимолекулярная адсорбция	192
5.4. Физическая и химическая адсорбция	196
5.4.1. Силы, приводящие к физической адсорбции	198
5.4.2. Химическая связь	203
5.4.2.1. Метод молекулярных орбиталей	204
5.4.2.2. Метод валентных связей	211
5.4.2.3. Заселенность перекрывания	213
5.5. Электронное состояние адатома	217
5.5.1. Физическая адсорбция	217
5.5.2. Химическая адсорбция	218

5.6. Энергия связи адатомов с поверхностью	229
5.6.1. Особенности химической связи с твердым телом	230
5.6.2. «Поверхностное соединение»	231
5.6.3. Влияние электронной структуры	233
5.6.4. Полуэмпирическая модель Хигучи	236
5.6.5. Расположение адчастицы на поверхности	240
5.6.6. О модели попарного взаимодействия	245
5.6.7. Значение предэкспоненциального множителя	247
5.7. Латеральное взаимодействие адатомов	248
5.8. Структура адсорбированных слоев	254
5.9. Изменение работы выхода	261
5.9.1. Дипольная модель	263
5.9.2. Модель однородного фона Лэнга	268
5.9.3. Оптимальная концентрация адсорбата	270
5.10. Поверхностная диффузия	271
5.10.1. Диффузия одиночных частиц	272
5.10.2. Анизотропия поверхностной диффузии	275
5.10.3. Туннельный механизм поверхностной диффузии	279
5.10.4. Диффузия кластеров	279
5.10.5. Химическая диффузия	280
5.10.5.1. Анизотропия химической диффузии	284
5.10.5.2. Концентрационная зависимость ПД	285
5.11. Химические реакции на поверхности. Катализ	289
 <i>Глава шестая</i>	
Тонкие пленки на поверхности твердого тела	299
6.1. Механизмы роста пленок	299
6.2. Эпитаксия	304
6.3. Зародыши и их образование	308
6.4. Электропроводность диспергированных пленок	316
6.5. Электропроводность тонких сплошных пленок	319
 Литература	 328