

О ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЕ КИСЛОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ Cu(110)

В.И.Марченко

Институт физики твердого тела АН СССР
142432, Черноголовка, Московская обл.

Поступила в редакцию 31 октября 1991 г.

Предложена теория доменной структуры в системе адсорбированных атомов кислорода на поверхности Cu(110).

Недавно была обнаружена ¹ периодическая полосовая доменная структура в системе адсорбированных атомов кислорода на поверхности (110) меди (см. рис. 1). Каждый из доменов представляет собой макроскопическую двумерную однородную фазу: в одной из них имеется моноатомный слой кислорода в структуре (2 × 1), в другой - газ атомов кислорода. Принципиальная возможность осуществления доменных структур такого типа связана с стрикционной неустойчивостью установленной более 10 лет назад ². В настоящей работе будет вычислена зависимость периода полосовой доменной структуры от концентрации фаз. Предлагаемая теория находится в удовлетворительном количественном согласии с данными наблюдения ¹.

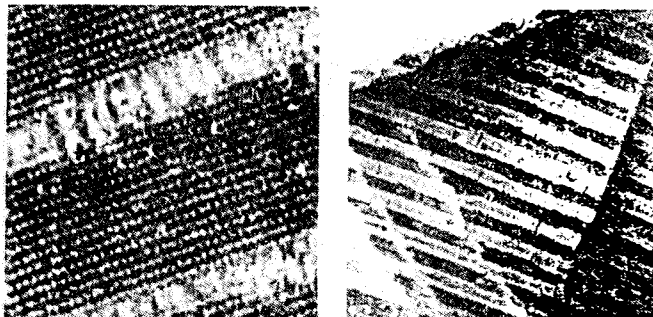


Рис. 1.

Энергия поверхности при деформировании кристалла в линейном по деформации приближении изменяется на величину

$$\int \beta_{\mu\nu} u_{\mu\nu} dS, \quad (1)$$

где $\beta_{\mu\nu}$ - тензор поверхностных натяжений, μ, ν - тангенциальные к поверхности x, y компоненты (см. ³). В каждом из сосуществующих в рассматриваемой доменной структуре состояний в согласии с их симметрией C_{2v} имеются две независимые компоненты β_{1xx} , β_{1yy} и β_{2xx} , β_{2yy} . Скачок этих компонент при переходе через границу двумерных фаз означает наличие

поверхностной силы действующей на объем кристалла. Возникающие деформации энергетически выгодны, так как поверхностный вклад в энергию линейен по деформациям. Величина же выигрыша имеет логарифмическую расходимость, что и является причиной возникновения обсуждаемой доменной структуры. Период структуры d определяется из минимизации плотности ее энергии

$$\frac{\gamma}{d} - \frac{A}{d}(\beta_{1xx} - \beta_{2xx})^2 \ln \frac{d}{af}, \quad (2)$$

где γ - обычная энергия линии раздела поверхностных фаз, a - характерное межатомное расстояние, $f = f(c)$ - искомая функция концентрации фаз c , константа A - определенная функция упругих модулей кристалла, например, в изотропном случае (см. 2,4)

$$A = \frac{(1 - \sigma^2)}{\pi E},$$

где E - модуль Юнга, σ - коэффициент Пуассона.

Функция f была фактически вычислена в работе 4 для изотропного кристалла. Покажем, что полученный там результат верен и для рассматриваемой структуры на поверхности (110) кубического кристалла. Поле деформации u_{xx} на поверхности вызванное линейным распределением поверхностной силы $F_x = \beta_{1xx} - \beta_{2xx}$ спадает по закону

$$u_{xx} = -AF_x x^{-1}, \quad (3)$$

где константа A по соображениям симметрии одинакова при $x > 0$ и $x < 0$. В силу линейности теории упругости деформация сводится к сумме деформаций от всех границ между доменами

$$u_{xx} = AF_x \sum \left(\frac{1}{nd - x} - \frac{1}{nd + cd - x} \right). \quad (4)$$

Сумма энергий (1) и объемной упругой энергии для равновесного деформированного состояния сводится (ср. ф-лы (1-2) в работе 4) к поверхностному интегралу

$$\frac{1}{2} \int \beta_{\mu\nu} u_{\mu\nu} dS. \quad (5)$$

Подставляя сюда выражение (4), проведем интегрирование (введя параметр обрезания a для устранения логарифмической расходимости на малых расстояниях) и суммируя полученный ряд логарифмов, найдем для функции $f(c)$ следующее выражение

$$f = c \prod_{n=1}^{\infty} \{1 - (c/n)^2\} = \frac{1}{\pi} \sin \pi c. \quad (6)$$

Минимизируя энергию (2) по периоду структуры, получим

$$d = \frac{\Delta}{\sin \pi c}, \quad (7)$$

где величина Δ экспоненциально зависит от характеристик поверхностных фаз и упругих констант кристалла, благодаря чему период структуры может быть макроскопическим 2.

Если пренебречь плотностью атомов кислорода в фазе 1×1 , а также наличием дефектов по кислороду в структуре 2×1 , то концентрация c однозначно определяется параметром θ_0 - долей заполненных атомами кислорода вакантных мест в первом адсорбционном слое

$$c = 2\theta_0. \quad (8)$$

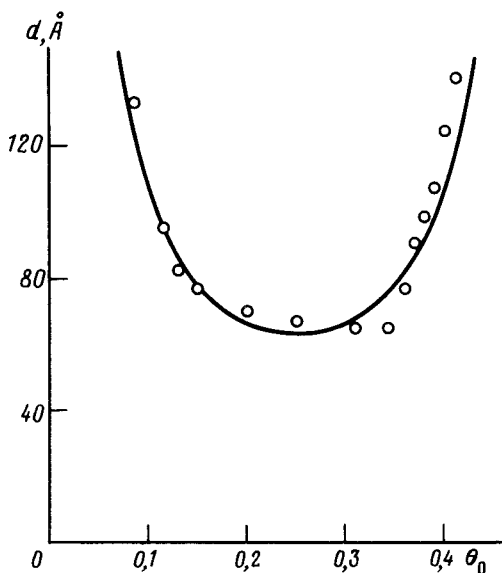


Рис. 2.

На рис.2 представлены данные наблюдения ¹ зависимости периода доменной структуры от заполнения кислорода при температуре 640К и теоретическая кривая, построенная по формуле (7) с учетом соотношения (8), параметр Δ выбран равным 63Å.

Отметим, что учет электростатических эффектов, дающих также отрицательный логарифмический вклад в энергию границ двумерных фаз на поверхности (см. ⁴ §3), как нетрудно убедиться, приводит лишь к перенормировке параметра A в выражении (2).

Отметим еще, что двумерная полосовая доменная структура возникающая из-за логарифмической энергии границ оказывается неустойчивой в изотропном случае ⁵. В рассмотренном же выше случае, когда энергия линии раздела между двумерными фазами γ является функцией ее ориентации на поверхности и имеется анизотропия в упругих константах, условия устойчивости полосовой структуры вполне выполнимы.

-
1. Kern K., Niehus H., Schatz A. et al., Phys. Rev. Lett., 1991, 67, 855.
 2. Марченко В.И. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, 397.
 3. Марченко В.И. Паршин А.Я. ЖЭТФ, 1980, 79, 257.
 4. Марченко В.И. ЖЭТФ, 1981, 81, 1141.
 5. Марченко В.И. ЖЭТФ, 1986, 90, 2241.