Письма в ЖЭТФ, том 32, вып.10, стр. 587 – 590   *20 ноября 1980 г.*

ИЗМЕНЕНИЕ СИММЕТРИИ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ВТОРОГО РОДА НА ПОВЕРХНОСТИ

И.П.Ипатова, Ю. Э.Китаев, А.В.Субашиев

Проведен теоретико-групповой анализ возможных типов поверхностных сверхструктур, образующихся при фазовых переходах второго рода на атомарно-чистых поверхностях твердых тел. Произведено сравнение результатов с экспериментальными данными.

Различные экспериментальные методики (дифракция медленных и быстрых электронов, дифракция атомов гелия, фотоэмиссионные методики) позволяют обнаружить на атомарно-чистой поверхности целого ряда кристаллов структуру, отличающуюся от объемной [1, 2]. Явление структурной перестройки поверхностного слоя конечной толщины, сопровождающееся изменением как трансляционной, так и точечной симметрии решетки, называется ***поверхностной реконструкцией*** (см. обзор [3]).

За последние годы в ряде экспериментов [4, 5] обнаружилось, что поверхностная реконструкция обратима по температуре. Естественно, поэтому, связать ее с фазовыми переходами на поверхности. Теоретические исследования [6] также показывают, что фазовые переходы на поверхности всегда происходят раньше, чем объемные структурные превращения, и могут иметь место даже в том случае, когда фазовые переходы в объеме вообще отсутствуют.

Поверхностная реконструкция может реализоваться либо как фазовый переход первого рода, либо как фазовый переход второго рода. Однако существует лишь небольшое число экспериментальных работ, в которых был определен тип фазового перехода на поверхности [4, 5].

Одним из критериев фазового перехода второго рода являются ограничения, налагаемые на возможные изменения симметрии, которые были установлены в работах Ландау и Лифшица [7]. Лифшицем [8] был проанализирован случай изменения трансляционной симметрии для обычных трехмерных кристаллов.

Эти же условия позволяют проанализировать и изменения трансляционной симметрии при фазовых переходах второго рода, происходящих в тонком приповерхностном слое, симметрия которого, как было указано Вуд [9, 10], должна описываться 80-ю двупериодическими группами в трехмерном пространстве. Правильность такого подхода косвенно подтверждается работой Заллена [11], где двупериодические группы в трехмерном пространстве были впервые использованы для получения правил отбора оптических переходов и для интерпретации спектров в слоистых кристаллах.

Необходимым условием фазового перехода второго рода является наличие пересекающихся элементов симметрии или инверсии в группе волнового вектора **k** соответствующего активного неприводимого представления [7, 8].

Цель данной работы – используя это условие и таблицы Вуд [10] для описания симметрии поверхностных структур, установить, какие изменения трансляционной симметрии (решетки Бравэ) при фазовых переходах второго рода на поверхности являются возможными. Поскольку наш анализ не включает в себя исследование условия отсутствия инварианта третьего порядка в разложении свободной энергии, то при этом из рассмотрения не исключаются и фазовые переходы второго рода, описываемые в рамках модели Поттса [12, 13].

Результаты анализа для всех пяти плоских решеток Бравэ, реализующихся с разными классами, приведены в таблице. В первом столбце указана решетка Бравэ, а во втором – кристаллический класс высокосимметричной фазы с добавленным в него центром инверсии (если он отсутствовал в классе)[1]; в третьем столбце приведены сверхструктуры низкосимметричной фазы, в которые решетка может перейти при фазовом переходе второго рода. Для поверхностных сверхструктур приняты обо-

---

[1] Поскольку для получения физически неприводимого (вещественного) представления требуется брать волновые функции как с вектором **k**, так и с −**k**, то звезды физически неприводимых представлений совпадают во всех пространственных группах, относящихся к кристаллическим классам, отличающимся только наличием центра инверсии.

значения, введенные Вуд [9]: $p\ (c)\ (n \times m)\ R\ \theta$, где индекс $p\ (c)$ обозначает примитивную (центрированную) элементарную ячейку; n и m – коэффициенты пропорциональности между новыми и старыми векторами трансляций, а θ – угол между ними. Векторы трансляции в косоугольной, простой прямоугольной и квадратной решетках выбраны вдоль сторон соответствующих фигур; в гексагональной решетке они выбираются под углом 120° друг к другу, а в центрированной прямоугольной – проведенными из центра элементарной ячейки к соседним вершинам.

Высокосимметричная фаза		Низкосимметричная фаза
Решетка Бравэ	Классы	Сверхструктуры
Косоугольная	$\bar{1}$, $2/m$	$p\,(2 \times 1)$, $p\,(1 \times 2)$, $c\,(2 \times 2)$
Простая прямоугольная	$2/m$, mmm	$p\,(2 \times 1)$, $p\,(1 \times 2)$, $c\,(2 \times 2)$
Центрированная прямоугольная	$2/m$, mmm	$p\,(2 \times 1)$, $p\,(2 \times 2)$, $c\,(2 \times 2)$
Квадратная	$4/m$, $4/mmm$	$p\,(2 \times 1)$, $p\,(2 \times 2)$, $c\,(2 \times 2)$
Гексагональная	$\bar{3}$, $\bar{3}m$, $6/m$, $6/mmm$	$p\,(2 \times 2)$, $c\,(2 \times 2)$
	$\bar{3}m$, $6/m$, $6/mmm$	$p\,(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\ R\ 30°$

Как следует из таблицы во всех классах с рассматриваемой решеткой Бравэ переходы одинаковы. Исключением является лишь гексагональная решетка, где в классе $\bar{3}$ отсутствует переход в сверхструктуру $p\,(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\ R\ 30°$.

Из таблицы видно, что идентифицированные как фазовые переходы второго рода превращения $p\,(1 \times 1) \leftrightarrow c\,(2 \times 2)$ на поверхностях (100) W и (100)Mo [5], имеющих квадратную решетку Бравэ, согласуются с результатами, полученными нами. Точно также соответствуют нашим результатам идентифицированные как фазовые переходы первого рода превращения $p\,(4 \times 5) \leftrightarrow p\,(2 \times 1) \leftrightarrow p\,(5 \times 1)$, наблюдавшиеся на поверхности (1 1 0) Si [4] (простая прямоугольная решетка Бравэ).

Авторы благодарны А.Л.Корженевскому за полезные обсуждения.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
11 июня 1980 г.

После переработки
24 октября 1980 г.

Литература

[1] E.Tosatti, Proc. 13-th Int. Conf. on Physics of Semicond, ed. by F.G.Fumi, Rome, 1976, p.21.

[2] W.Mönch. Surf. Sci., 86, 672, 1979.

[3] И.П.Ипатова, Ю.Э.Китаев. А.В.Субашиев. Сб. Проблемы физики полупроводников (по Материалам IX Зимней школы по физике полупроводников), изд. ФТИ им. А.Ф.Иоффе АН СССР, Л., 1979, с.102.

[4] Б. З.Ольшанецкий, С. М.Репинский, А.А.Шкляев. Письма в ЖЭТФ, 25, 195, 1977.

[5] T.E.Felter, R.A.Barker, P.J.Estrup. Phys. Rev.Lett., 38, 1138, 1977.

[6] Б.П.Антонюк. ФТТ, 20, 2293, 1978.

[7] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика. М., изд. "Наука", 1976.

[8] Е.М.Лифшиц. ЖЭТФ, 11, 255, 269, 1974.

[9] E.A.Wood. J.Appl.Phys., 35, 1306, 1964.

[10] E.A.Wood. Bell. Syst.Techn.J., 43, 541, 1964.

[11] R.Zallen, M.L.Slade, A.T.Ward. Phys. Rev. B3, 4257, 1971; R.Zallen, In Proc.12-th Int. Conf. on Physics of Semicond., Teubner, Stuttgart, 1974, p.621.

[12] E.Domany, M.Schick, J.S.Walker. Phys. Rev. Lett., 38, 1148, 1977.

[13] M.Bretz. Phys. Rev.Lett., 38, 501, 1977.