

## ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АДСОРБИРОВАННОМ МОНОСЛОЕ

Г.В.Уймин, Л.Н.Шур

Показана возможность существования ориентационных фазовых переходов первого рода в адсорбированном монослое на грани (011) объемноцентрированного кубического кристалла (типа вольфрама).

В последнее время и теоретики и экспериментаторы проявляют большой интерес к упорядоченным системам, обладающим свойством несоизмеримости их подсистем. Хорошо известными примерами, демонстрирующими несоизмеримость с периодом решетки периодов возникающих сверхструктур, являются волны зарядовой плотности, а также магнитное упорядочение в геликоидальных магнетиках. Много внимания также уделяется явлениям в монослоях адсорбированных атомов (адатомов) (см. обзор [1]), где часто структура монослоя не имеет ничего общего со структурой подложки.

Характер возникающей решетки адатомов определяется двумя факторами: периодическим потенциальным рельефом подложки и взаимодействием между адатомами. В зависимости от типа подложки это взаимодействие бывает в основном двух классов. К первому относится диполь-дипольное отталкивание адатомов. Оно оказывается весьма существенным, если подложка является металлом (о природе взаимодействия и его характере см. [1 - 3]). Ко второму классу относится ван-дер-ваальсовское притяжение на больших расстояниях и отталкивание внешними электронными оболочками адатомов на малых. Это взаимодействие является типичным в монослое на графитовой поверхности [4].

Здесь мы рассмотрим первый класс взаимодействий, приводящий в случае слабого потенциального рельефа поверхности к плотноупакованной структуре монослоя с постоянной решетки, определяемой концентрацией адатомов. Основной вклад в полную энергию  $E = E_0 + E_1$  дает взаимодействие между адатомами

$$E_0 = \frac{1}{2} g \sum_{i \neq j} |r_i - r_j|^{-3}, \quad (1)$$

а их взаимодействие с подложкой

$$E_1 = V \sum_i (\cos k_1 r_i + \cos k_2 r_i) \quad (2)$$

рассматривается как возмущение. По этой причине в периодическом потенциале (2) мы не учитываем кратных гармоник. Волновые векторы

$k_1$  и  $k_2$  определяют структуру поверхности подложки. Координаты адатомов

$$r_i = r_i^{(0)} + u_i \quad (3)$$

складываются из их равновесных положений  $r_i^{(0)}$  в правильной треугольной решетке и смещений  $u_i$ , которые находятся из минимизации полной энергии  $E$ . Подстановка (3) в (1) и (2) и учет главных членов разложения по смещениям приводит нас к следующему выражению для полной энергии:

$$E = E_0^{(0)} + \frac{1}{2} \sum_{q, \alpha, \beta} \epsilon_{\alpha\beta}(q) u_\alpha(q) u_\beta(-q) \quad (4)$$

$$-V \sum_i (k_1 u_i \sin k_1 r_i^{(0)} + k_2 u_i \sin k_2 r_i^{(0)}),$$

где  $E_0$  — невозмущенная энергия взаимодействия адатомов,

$$u_\alpha(q) = N_a^{-1/2} \sum_j u_{j\alpha} \exp(iq r_j^{(0)}) \quad (5)$$

— фурье-образ  $\alpha$ -компоненты смещения ( $N_a$  — полное число адатомов) и

$$\epsilon_{\alpha\beta}(q) = 3g \sum_j (1 - \cos q r_j^{(0)}) \frac{5 x_{j\alpha}^{(0)} x_{j\beta}^{(0)} - (r_j^{(0)})^2 \delta_{\alpha\beta}}{(r_j^{(0)})^7} \quad (6)$$

Возникающие при минимизации энергии (4) смещения

$$u_\alpha(k_{(1,2)}) = \frac{i}{4} V N_a^{1/2} (\epsilon^{-1}(k_{(1,2)}))_{\alpha\gamma} k_{(1,2)\gamma} \quad (7)$$

приводят к выигрышу энергии

$$\Delta\epsilon = \frac{1}{N_a} \Delta E = -\frac{1}{8} V^2 \left\{ k_1 \beta (\epsilon^{-1}(k_1))_{\beta\gamma} k_{1\gamma} + k_2 \beta (\epsilon^{-1}(k_2))_{\beta\gamma} k_{2\gamma} \right\} \quad (8)$$

которая, вообще говоря, зависит от взаимной ориентации пары векторов  $(k_1, k_2)$  и пары базисных векторов в правильной треугольной решетке адатомов  $(a_1, a_2)$ . Мы произвели численный расчет функции (8) в зависимости от угла поворота  $\alpha$  (см. рис. 1) для конкретного случая грани (011) объемноцентрированного кристалла типа вольфрама. Расчет производился в широкой области концентраций адатомов  $c = N_a / N$  ( $N$  — полное число атомов поверхности). Оказались возможными фазовые переходы первого рода со скачкообразным изменением  $\alpha$  при концентрациях, указанных в нижеследующей таблице. Там же дается изменение угла  $\alpha$  при переходе от меньших концентраций к большим.

$c$	$a <$	$a >$
0,18	$8^\circ$	$20^\circ$
0,27	$25^\circ$	$-3^\circ$
0,47	$-5^\circ$	$8^\circ$
0,66	$15^\circ$	$25^\circ$

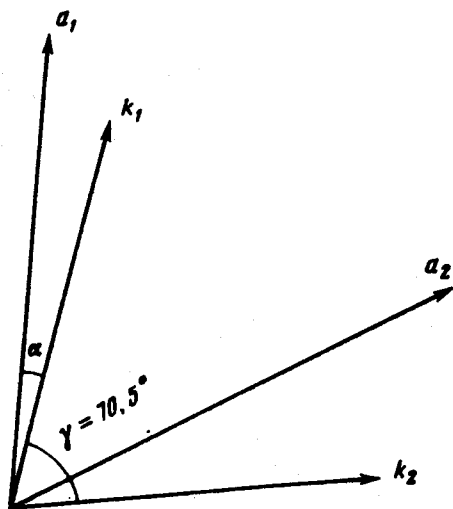


Рис.1. Взаимная ориентация пар векторов  $a_1, a_2$  и  $k_1, k_2$  для случая грани (011) решетки вольфрама

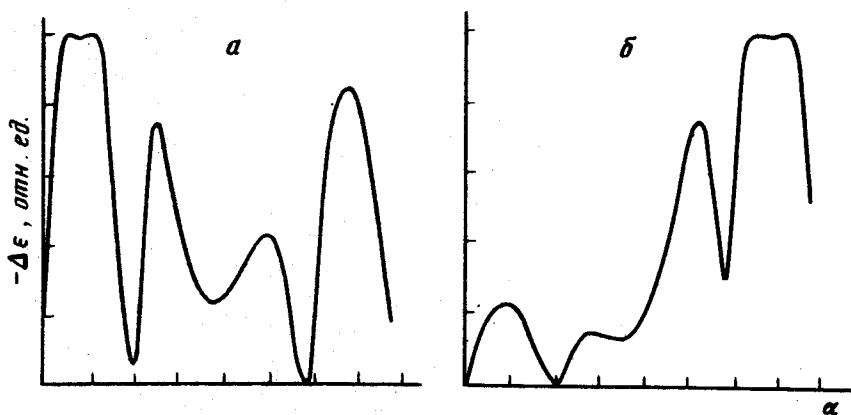


Рис.2. Значения функции (8) для концентраций  $c = 0,268$  (а) и  $c = 0,254$  (б)

На рис.2 показано изменение вида функции (8) при концентрации, близкой к  $c \sim 0,27$ . В экспериментах по дифракции медленных электронов была обнаружена [5] почти скачкообразная переориентация рефлексов, даваемых монослоем атомов цезия с концентрацией равной  $0,22 \pm 0,03$ , напыленных на грань (011) вольфрама. Угол поворота решетки адатомов в этих экспериментах был близок к  $30^\circ$ .

Следует отметить, что рассмотренная здесь теория возмущений отказывает при приближении одного из векторов обратной решетки адато-

мов к векторам  $k_1$  и  $k_2$ . При концентрациях, определяемых этим условием, должно происходить одномерное согласование решетки адатомов с подложкой.

Авторы благодарны В.Л.Покровскому за интерес к работе и А.Г.Наумовцу и А.Г.Федорусу за любезно предоставленную информацию об экспериментальных работах.

Институт теоретической физики  
им. Л.Д.Ландау  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
23 мая 1978 г.

### Литература

- [1] Л.А.Большов, А.Л.Напартович, А.Г.Наумовец, А.Г.Федорус. УФН, 122, 125, 1977.
  - [2] J.R.Schriffer. J. Vac. Sci. and Technol., 9, 561, 1972
  - [3] А.М.Габович, Э.А.Пашицкий. ФТТ, 18, 377, 1976.
  - [4] M.Nielsen, W.D.Ellenson, J.P.McTague. J. de Physique, 38, C4-1, 1977.
  - [5] A.G.Fedorus, A.G.Naumovets. Surf. Sci., 21, 426, 1970.
-