

перехода 2-го рода, то можно исследовать устойчивость идеальной поверхности относительно разл. смещений поверхностных атомов из положений равновесия. Любое смещение поверхностного атома можно представить в виде суперпозиции смещений, соответствующих нормальным колебаниям (см. *Колебания кристаллической решётки*). Смещение  $\xi$  поверхностного атома из положения равновесия  $\xi_0$  характеризуется волновым вектором  $q_{||}$ , параллельным поверхности. Если смещение поверхностного атома приводит к увеличению потенц. энергии  $U$  (кривая 1, рис. 3), то исходному состоянию

$$\lambda = 2\pi \left[ \left( \frac{q_x}{\pi} \right)^2 + \left( \frac{q_y}{\pi} \right)^2 \right]^{-1/2} = \sqrt{2} a.$$

Такую структуру обозначают  $(2 \times 2) R 45^\circ$  или  $C(2 \times 2)$ .

Возможные перестройки поверхности, происходящие по типу фазового перехода 2-го рода, можно найти теоретико-групповыми методами. Р. п. охватывает неск. приповерхностных кристаллич. плоскостей, составляющих приповерхностный слой [4].

Р. п. с бóльшим периодом, напр. структуры  $(7 \times 7)$  на поверхности (111) Si, связывают с возникновением узкой энергетич. зоны *поверхностных состояний* для электронов оборванных связей. На поверхности (111) Si на каждый поверхностный атом приходится 1 оборванная связь. Поэтому зона поверхностных состояний заполнена только наполовину. Энергию электрона в такой зоне можно рассчитывать методом сильной связи (см. *Зонная теория*):

$$\epsilon = \epsilon_0 - 2J \left[ \cos p_x a + 2 \cos \frac{p_x a}{2} \cos \frac{\sqrt{3} p_y a}{2} \right].$$

Здесь  $p_x$  и  $p_y$  — проекции квазиимпульса электрона,  $J$  — интеграл перекрытия электронных волновых ф-ций. *Ферми-поверхность* для таких электронов является шестиугольником. Из-за наличия плоских граней электрон-фононное взаимодействие даёт аномально большой сдвиг частоты нормального колебания с волновым вектором  $q_{||} = 2p_F$  ( $p_F$  — импульс Ферми). Если при нек-ром сдвиге частоты результирующая частота  $\omega^2(2p_F) = 0$ , то поверхность кристалла неустойчива относительно такого колебания и произойдёт Р. п. Устойчивое состояние соответствует волне статич. смещений с длиной волны  $\lambda = 2\pi/q_{||} = \pi/p_F$ , соизмеримой с постоянной решётки  $m\lambda = na$ , где  $m$  и  $n$  — целые числа. Период новой структуры определяется числом  $n$ . Для поверхности (111) Si число  $n = 7$ , что соответствует структуре  $(7 \times 7)$ .

Исследования атомарно-чистой поверхности важны для понимания свойств границы раздела кристаллов. По-видимому, нач. стадии адсорбции и роста кристаллов (см. *Кристаллизация*) определяются свойствами реконструированных границ раздела [5].

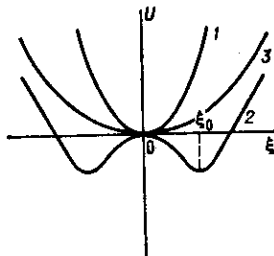
*Лит.:* 1) Наумов А. Г., Исследование структуры поверхностей методом дифракции медленных электронов: достижения и перспективы, «Укр. Физ. ж.», 1978, т. 23, № 10, с. 1585; 2) Photoemission and electronic properties of surfaces, ed. by B. Feuerbacher, B. Fitton, R. F. Willis, Chichester — [a.o.], 1978; 3) Olshansky B. Z., Shklyayev A. A., Phase transition on clean Si (110) surfaces, «Surf. Sci.», 1977, v. 67, p. 581; 4) Иратова И. П., Китаев Ю. Е., Landau theory of second-order, phase transitions on solid surfaces, «Prog. in Surf. Sci.», 1985, v. 18, № 3, p. 189; 5) Abstreiter G., Inelastic light scattering in semiconductor heterostructures, в кн.: Festkörperprobleme, v. 24 — Advances in solid state physics, Braunschweig, 1984.

И. П. Иратова.

**РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ** — процесс образования и роста (или только роста) структурно более совершенных кристаллич. зёрен *поликристалла* за счёт менее совершенных зёрен той же фазы. Р. начинается при нек-рой темп-ре  $T_p$ , к-рая зависит от хим. состава, концентрации дефектов, в частности *дислокаций*. Далее с повышением темп-ры  $T$  скорость Р. растёт. Особенно интенсивно она протекает в пластически деформированных материалах (см. *Пластичность*). Зародышами новых зёрен являются дислокац. ячейки.

Различают 3 стадии Р.: первичную, когда в деформиров. материале образуются новые неискажённые зёрна, к-рые растут, поглощая зёрна, искажённые деформацией; собирательную Р. — неискажённые зёрна растут за счёт друг друга, вследствие чего ср. величина зёрна увеличивается; вторичную Р., к-рая отличается от собирательной тем, что способностью к росту обладают только немногие из неискажённых зёрен. В ходе вторичной Р. структура характеризуется разл. размерами зёрен. Движению *межзёрных границ* препятствуют дисперсные частицы (размером  $\sim$  нм) др. твёрдых фаз (оксидов, карбидов и т. д.) и субмикроросты;

Рис. 3. Зависимость потенциальной энергии  $U$  от величины смещения поверхностного атома  $\xi$ : кривая (1) соответствует устойчивому равновесию; кривая (2) изображена с учётом ангармонизма колебаний и соответствует реконструированной поверхности;  $\xi_0$  — новые положения равновесия.



поверхности соответствует минимум  $U$  и поверхность устойчива. Если смещение поверхностных атомов приводит к уменьшению потенц. энергии (кривая 2 вблизи начала координат), то исходное состояние соответствует максимуму потенц. энергии. Поверхность при этом неустойчива, происходит Р. п. Новые положения равновесия  $\xi_0$  определяются ангармонизмом колебаний. С учётом ангармонич. членов  $U(\xi)$  имеет вид полной кривой 3.

Условие максимума или минимума потенц. энергии определяется знаком производной  $d^2U/d\xi^2$ , к-рая пропорц. квадрату частоты поверхностного колебания  $\omega^2(q_x)$ . Значение  $q_x^0$ , для к-рого  $\omega(q_x^0) = 0$  (мягкая мода), соответствует колебанию, но отношению к к-рому поверхность неустойчива. Именно  $q_x^0$  определяет пространственный период новой устойчивой поверхностной конфигурации атомов, соответствующей реконструированной поверхности.

На рис. 4. приведены 2 примера Р. п. (100) кубич. кристалла. Если мягкая мода возникает в точке  $X$  зоны Бриллюэна (см. *Бриллюэна зона*) с координатами ( $q_x^0 = \pi/a$ ,  $q_y^0 = 0$ ), то на поверхности устанавливается «волна» статич. смещений с периодом  $\lambda = 2\pi/q_x^0 = 2a$ ,



Рис. 4. Примеры реконструкции поверхности (100) кубического кристалла: а — реконструкция за счёт мягкой моды в точке  $X$  зоны Бриллюэна; новая элементарная ячейка показана пунктиром; б — реконструкция за счёт мягкой моды в точке  $M$  зоны Бриллюэна; новая элементарная ячейка показана пунктиром.

$$(q_x^0 = \pi/a, q_y^0 = \pi/a),$$

то на поверхности устанавливается волна статических смещений в направлении, составляющем угол  $45^\circ$  с осями  $Ox$  и  $Oy$  и с периодом