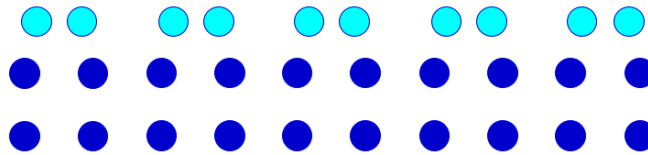


# Επιφανειακή Αναδόμηση

Τσανάκας Μιχαήλ-Δωρόθεος  
Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Κρήτης

Τα άτομα σε ένα κρυσταλλικό υλικό βρίσκονται στη θέση ελάχιστης ενέργειας, η οποία εξαρτάται από το δυναμικό που ασκούν τα γύρω άτομα. Στην επιφάνεια των κρυσταλλικών υλικών, λόγω έλλειψης ατόμων σε ανώτερο στρώμα ή λόγω εναπόθεσης ατόμων από το περιβάλλον, οι θέσεις ελάχιστης ενέργειας αλλάζουν για τα επιφανειακά άτομα και για τα άτομα κοντά στην επιφάνεια, καθώς δέχονται δυνάμεις μόνο από κατώτερα στρώματα.



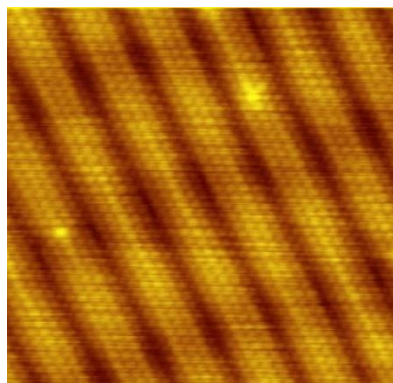
**Εικόνα 1:** Σχηματική απεικόνιση αναδόμησης επιφάνειας. [1]

Η ενέργεια των ατόμων στην επιφάνεια εμφανίζει εξάρτηση από τη δομή της μοναδιαίας κυψελίδας από τη οποία αποτελείται το υλικό. Συγκεκριμένα η ενέργεια μπορεί να υπολογιστεί, χωρίζοντας τη δομή σε σκαλοπάτια ως:

$$\gamma_{hkl}^{\sigma} = \frac{E_{slab}^{hkl,\sigma} - E_{bulk}^{hkl} \times n_{slab}}{2 \times A_{slab}}$$

Όπου  $hkl$  είναι οι δείκτες Miller,  $E_{slab}$  και  $E_{bulk}$  οι ενέργειες του σκαλοπατιού και του σώματος της δομής,  $n_{slab}$  ο αριθμός των σωματιδίων στο σκαλοπάτι και  $A_{slab}$  το εμβαδόν του σκαλοπατιού. [2]

Συγκρίνοντας τη δομή των ατόμων στην επιφάνεια με την δομή των ατόμων στο κύριο σώμα του κρυστάλλου μπορούμε να υπολογίσουμε το μέγεθος της αναδόμησης της επιφάνειας. Για τη μέτρηση των θέσεων στην επιφάνεια του κρυστάλλου χρησιμοποιούνται διάφορες μέθοδοι όπως περίθλαση ηλεκτρονίων χαμηλής ενέργειας (LEED) φασματοσκοπία οπισθοσκέδασης Rutherford, με κύρια όμως τη scanning tunneling microscopy (STM).



**Εικόνα 2:** Αναδόμηση στην επιφάνεια Au(100) με χρήση scanning tunneling microscopy (STM). Τα άτομα της επιφάνειας σχηματίζουν στήλες και πηγάδια. [1]

Παράδειγμα αναδόμησης αφορά τη δομή του Si(100), όπου παρατηρείται μεταβολή στη δομή των ατόμων της επιφάνειας λόγω των 2 ελεύθερων δεσμών που προκύπτουν. Η αναδόμηση που παρατηρείται είναι της μορφής 1x1 τετράγωνων δομών από άτομα Si, ενώ κόβοντας ένα κρύσταλλο Si(111) η δομή που δημιουργείται σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι της μορφής 2x1 ενώ σε υψηλές μεταβάλλεται σε 7x7.

## References

[1] [https://en.wikipedia.org/wiki/Surface\\_reconstruction](https://en.wikipedia.org/wiki/Surface_reconstruction)

[2] R. Tran, Z. Xu, B. Radhakrishnan, D. Winston, W. Sun, K. A. Persson, S. P. Ong, *Scientific Data*, Surface energies of elemental crystals, **3** (2016)

[3] Z. Miłosz, P. Wojciechowski, I. Zgrajek, M. Wróblewska-Marciniak, S. Mielcarek, F. Stobiecki, M. Lewandowski, *Applied Surface Science*, Scanning tunneling microscopy study of Cu-induced surface restructuring of Si(100)-(2 × 1), **480** (2019) 1156-1161