

ТАБЛИЦА Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА И АНИЗОТРОПИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ.

Бокарев В.П., Красников Г.Я.

АО «НИИМЭ»

До настоящего времени к одним из самых малоизученных физико-химических свойств поверхности кристаллических материалов относится анизотропия поверхностных свойств.

Трудности в экспериментальном определении анизотропии поверхностных свойств заключаются в отсутствии высокоточных экспериментальных методов определения анизотропии поверхностной энергии монокристаллов из-за влияния на величину поверхностной энергии различных дефектов кристаллической структуры, физических и химических примесей и наличия только косвенных методов определения анизотропии через наиболее достоверно изученные поверхностные свойства.

Поэтому наиболее распространены не экспериментальные, а теоретические методы расчёта поверхностных свойств кристаллов и их анизотропии базирующиеся на различных подходах к данному вопросу. Применяемые при расчётах модели основаны на разнообразных теоретических подходах, использующих сложные подгоночные коэффициенты для описания различных по химическим связям веществ. При этом для облегчения расчёта анизотропии поверхностных свойств в большинстве моделей используются диаграммы Вульфа, в которых за поверхность с минимальным значением поверхностной энергии принимаются поверхности с максимальной ретикулярной плотностью, т.е. поверхности кристалла, растущие с максимальными скоростями и обладающие максимальным адсорбционным потенциалом, что свидетельствует о максимальном значении поверхностной энергии, т.к. в соответствии с уравнением Дюпре работа адгезии одной твёрдой фазы к другой численно равна сумме поверхностных энергий этих фаз, за вычетом поверхностной энергии границы раздела между этими фазами.

В связи с противоречивостью теоретических и экспериментальных данных по анизотропии поверхностных свойств кристаллов нами была предложена модель «координационного плавления кристалла» базирующаяся на упрощённом термодинамическом расчёте поверхностной энергии идеального монокристалла, применённом к поверхностному слою толщиной в первую координационную сферу атомов. Такой подход позволил рассчитать поверхностные энергии 97 химических элементов Периодической системы Д.И. Менделеева по известным из справочников их физическим свойствам (плотности, температуре плавления, теплоёмкости и параметрам кристаллической структуры).

Однако вопрос о связи анизотропии работы выхода электрона из разных граней кристалла с анизотропией поверхностной энергии однозначно решен не был. Для его решения мы, используя экспериментальные данные по величинам поверхностных энергий и работам выхода электрона, построили гомологические ряды металлов, отнеся к гомологам металлы, находящиеся в одной и той же группе и подгруппе элементов Периодической системы Д.И. Менделеева.

Оказалось, что в рядах гомологов металлам с большими значениями поверхностной энергии соответствуют большие значения работы выхода электрона. Таким образом, анизотропия работы выхода электрона в монокристалле совпадает с анизотропией поверхностной энергии, что подтверждается данными по анизотропии работы выхода электрона приведённым в разных теоретических работах.