

05;11

Атомная релаксация на изломах ступенек поверхности $\{112\}$ вольфрама

© Т.И. Мазилова, И.М. Михайловский

Национальный научный центр
„Харьковский физико-технический институт“, Украина

Поступило в Редакцию 6 мая 2003 г.

Методами полевой ионной микроскопии исследовалось низкотемпературное полевое испарение ступенек $\langle 111 \rangle$ на грани $\{112\}$ вольфрама. Установлено, что атомы на изломах ступенек аномально устойчивы к полемому испарению. Показано, что этот эффект связан с релаксацией атомов на изломах ступенек. На основании геометрического анализа ионно-микроскопических изображений рассчитана нормальная к поверхности компонента релаксационного смещения атомов на изломах ступенек.

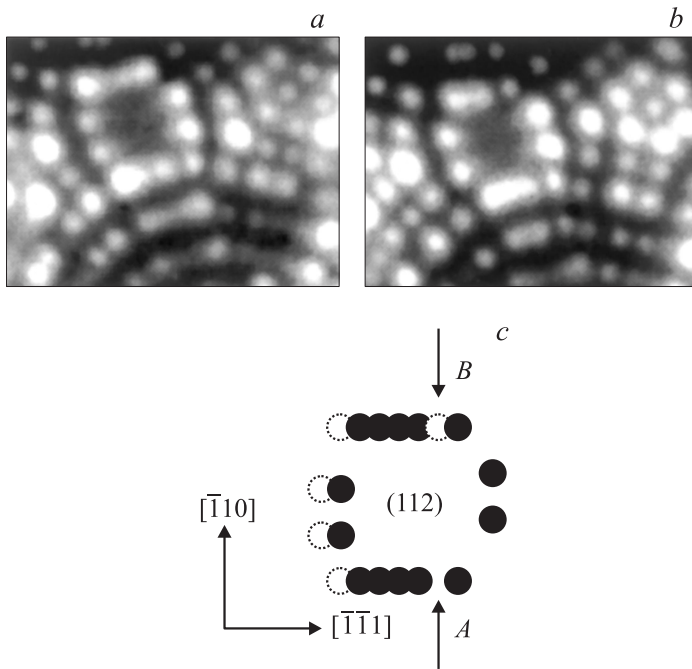
Исследования тонкой структуры поверхностных слоев привлекают в последние годы внимание в связи с развитием технологии наноразмерных систем [1,2]. Релаксационные субатомные смещения поверхностных слоев в значительной мере определяют равновесную форму кристаллов. Большинство выполненных к настоящему времени методами дифракции медленных электронов исследований релаксации поверхности относится к плоским плотноупакованным граням. Значительно меньше исследованы вицинальные (ступенчатые) поверхности. Трудности определения релаксационного состояния таких границ связаны прежде всего с относительно небольшим количеством поверхностных центров, рассеивающих электроны. К настоящему времени экспериментально исследована структура и релаксационное состояние только немногих вицинальных поверхностей, описываемых регулярно расположенными параллельными рядами атомных ступенек [2,3]. Экспериментальная информация о релаксации атомов на изломах ступенек отсутствует. Вместе с тем именно эти особенности морфологии поверхности контролируют кинетические процессы на реальных поверхностях, включая поверхностную самодиффузию и рост кристаллов. Атомы на изломах в значительной мере определяют электронную структуру поверхности и ее физико-химические свойства в сильных электрических полях. Из-

ломы являются эффективными концентраторами электрических полей, в результате чего именно атомы на изломах вносят основной вклад в формирование полевого ионно-микроскопического изображения. Полевой ионный микроскоп (ПИМ) позволяет создавать с помощью полевого испарения воспроизводимые конфигурации поверхностных ступенек с изломами и выявлять их тонкую структуру с атомным разрешением [4,5]. Локальная напряженность электрического поля, определяющая яркость и контраст ПИМ изображения, существенно зависит от взаимного расположения атомов на изломах и эффективной электронной поверхности. Однако получить информацию о нормальных к поверхности смещениях атомов по ПИМ изображениям в настоящее время не представляется возможным из-за отсутствия калибровочных данных о релаксации поверхностных атомов на изломах ступенек.

Количественная информация о нормальных к поверхности релаксационных смещениях атомов может быть получена при анализе формирования атомной топографии поверхности в процессе полевого испарения [6]. В настоящей работе изучена кинетика изменения локальной атомной топографии поверхности вблизи изломов ступенек на грани $\{211\}$ в процессе низкотемпературного полевого испарения и показано, что атомная морфология поверхности существенно зависит от релаксационных смещений атомов на изломах.

Объектом исследования служили игольчатые образцы, изготовленные электрополировкой из вольфрама чистотой 99.98%. ПИМ анализ проводился в микроскопах при давлении остаточных газов порядка 10^{-10} Па и давлении гелия $2 \cdot 10^{-3}$ Па при 40–78 К. Поверхность острия очищалась низкотемпературным полевым испарением. Для интерпретации ПИМ изображений использовалась геометрическая модель, которая удовлетворительно воспроизводит атомную морфологию поверхности кристаллов, сформированную полевым испарением [4].

На рисунке приведены ПИМ изображения грани $\{211\}W$ и соответствующая схема расположения атомов. Образец с радиусом кривизны $R = 15$ nm был скруглен полевым испарением при 40 К. На грани $\{211\}W$ плотноупакованные атомные ряды $\langle 111 \rangle$ расположены на расстоянии $a\sqrt{2}$. На грани $\{211\}W$ существуют две различные геометрии изломов ступенек, ориентированных вдоль плотноупакованных направлений $\langle 111 \rangle$: изломы $(112) [\bar{1}\bar{1}1]$ и $(112) [11\bar{1}]$. Эти изломы не одинаковы, так как плоскость $\{111\}$ не является плоскостью зеркального изображения. В использованных обозначениях ступенек вектор $\langle 111 \rangle$



Ионно-микроскопические изображения до (a) и после (b) полевого испарения атомов со ступенек грани (112) и схема расположения поверхностных атомов (c).

указывает на направление „вниз со ступеньки“. Разрешение в данных условиях несколько меньше 0.27 nm, в результате чего изображения отдельных атомов в плотноупакованных цепочках частично перекрываются (см. рисунок, c).

Атомы на изломе (112) $[\bar{1}\bar{1}1]$ оказались аномально стабильны к полемому испарению. Скорость испарения атома на изломе в 5–7 раз меньше скорости испарения других атомов на ступеньке $\langle 111 \rangle$. Испарение плотноупакованной цепочки после удаления полемым испарением предыдущего атомного слоя $\{211\}$ начинается не с излома (112) $[\bar{1}\bar{1}1]$, как следовало бы ожидать, исходя из общей теории испарения. Новый цикл послыонного полевого испарения обычно начинается с полевого испарения ближайшего к излому атома, второго атома от края

ступеньки. В результате образуется темный зазор на неразрешенной ранее атомной ступеньке. Такой темный зазор присутствует уже на исходном ПИМ изображении. Это положение испарившегося атома отмечено стрелкой *A* на схеме рисунка, *c*. При дальнейшей выдержке в электрическом поле напряженностью 57.5 V/nm наблюдалось регулярное полевое испарение четырех атомов на изломах ступенек грани (112) и аномальное испарение ближайшего к излому (112) $[\bar{1}\bar{1}1]$ атома, отмеченного на схеме стрелкой *B*. В терминах геометрической модели наличие аномального полевого испарения означает, что атомы на изломах и ближайшие к ним атомы взаимно смещены в направлении, нормальном к поверхности. Малые релаксационные смещения атомов на ступеньке в направлении, перпендикулярном к поверхности, приводят к тангенциальному смещению точки испарения. Такой эффект аналогичен непрямому увеличению [4], явлению, широко используемому при интерпретации ПИМ изображений дефектов решетки. Тангенциальное смещение координаты испаряемой точки минимально и равно $a/2\langle 111 \rangle$. Вблизи кристаллографического полюса локально-сферического образца взаимное нормальное смещение U_z соседних атомов на изломе и внутри ступеньки равно $U_z^{ks} = d_{nn}L/2R$, где L — длина рассматриваемой ступеньки. В наших экспериментах отношение L/R лежало в интервале 0.075–0.120 и соответственно среднее значение U_z^{ks} было равным 0.014 ± 0.005 nm.

Анализ расположения атомов на поверхности до и после полевого испарения (см. рисунок, *a, b*) показывает, что образование темного зазора на изображении ступеньки не связано с тангенциальным смещением крайних атомов в цепочке (112) $[\bar{1}\bar{1}1]$. В окрестности излома на этих микрофотографиях положения всех атомов остаются неизменными. Это исключает возможность образования темного зазора вследствие смещения вдоль поверхности крайнего атома на ступеньке в положение, стабилизированное электрическим полем.

Релаксация атомов на изломах до настоящего времени не исследовалась какими-либо экспериментальными методами. Современные исследования ступенчатых поверхностей ГЦК-металлов [3] показывают, что атомная релаксация на ступеньках существенно повышена по сравнению с таковой на относительно плотноупакованных гладких поверхностях. Различие между релаксированными и нерелаксированными электронными плотностями вызывает дополнительную разность потенциалов, которая приводит к смещению внутрь металла поверх-

ностного атома. Этот эффект непосредственно связан со „сглаживанием электронной поверхности“ [7]. Он должен быть более выражен для таких открытых поверхностных конфигураций, какими являются исследованные в настоящей работе изломы ступенек на плотноупакованной поверхности {211}.

Таким образом, в настоящей работе обнаружены аномалии низкотемпературного полевого испарения, связанные с нормальными к поверхности смещениями атомов на изломах ступенек, и показано, что этот эффект может быть использован для количественной оценки дифференциального смещения атомов.

Авторы выражают благодарность Н. Вандерке, Дж. Смит и Р. Форбсу за внимание к работе и полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Международного фонда „Научно-технологический центр в Украине“, проект № 1804.

Список литературы

- [1] *Swamy K., Bertel E., Vilfan I.* // Surf. Sci. 1999. V. 425. P. L369.
- [2] *Kiriukhin S., Sutcu L., Conrad E.H.* // Phys. Rev. 1999. V. B 59. N 10. P. 6736–6741.
- [3] *Hirsimäki M., Pitkänen T., Valden M.* et al. // Surf. Sci. 2000. V. 454–456. N 1. P. 6–10.
- [4] *Miller M.K., Cerezo A., Hetherington M.G., Smith G.D.W.* Atom-Probe Field Ion Microscopy. Oxford: Oxford University Press, 1996. 509 p.
- [5] *Syvorov A.L., Razinkova T.L., Sokolov A.G.* // Phys. Stat. Sol. 1980. V. A61. N 1. P. 11–52.
- [6] *Mikhailovskij I.M., Smith G.D.W., Wanderka N., Mazilova T.I.* // Ultramicroscopy. 2003. V. 95. P. 157–163.
- [7] *Adams D.L., Sorensen C.S.* // Surf. Sci. 1986. V. 166. N 2. P. 495–511.