

05; 11; 12

© 1993

## ДИАГНОСТИКА ТОЧЕЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Е.В. Б л а г о в, Г.Л. К л и м ч и ц к а я,  
В.М. М о с т е п а н е н к о, В.И. П а н о в,  
И.Ю. С о к о л о в

Применение метода атомно-силовой микроскопии (АСМ) [1-5] к изучению поверхности облученных материалов может дать новые сведения о физике радиационных повреждений поверхности в нанометровой области. Использование данного метода обещает быть особенно плодотворным при исследовании радиационных повреждений на ранних стадиях облучения, когда радиационные дефекты невелики и трудно различимы обычными способами [6]. Таким образом, атомно-силовая микроскопия может рассматриваться как существенное дополнение к известным методам атомно-силовой микроскопии [7], электронной микроскопии высокого разрешения [8, 9], малоуглового рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов [10, 11], сканирующей туннельной микроскопии [12, 13], используемым для исследования радиационных повреждений материалов.

Рассмотрим вопрос о возможности наблюдения точечных дефектов методом АСМ на примере вакансии. При изучении таких дефектов целесообразно выбирать режим работы АСМ с наибольшим разрешением порядка единиц ангстрем. Столь высокое разрешение достигается, если сканирование острия АСМ над исследуемой поверхностью осуществляется вдоль линий постоянной силы  $> 10^{-8} N$ . При этом ван-дер-ваальсовым притяжением между острием и образцом можно пренебречь (оно составляет менее 10% полной силы) и величина взаимодействия определяется обменным отталкиванием между ближайшими атомами острия и образца [4]. Потенциал таких сил, действующих между отдельными атомами, имеет вид

$$V^{atom}(r) = \frac{\alpha}{r^{12}}, \quad (1)$$

где  $\alpha$  - константа обменного взаимодействия,  $r$  - расстояние между атомами острия и образца.

Поскольку взаимодействие (1) является короткодействующим, будем считать, что эффективно взаимодействуют только те атомы, которые „касаются“ друг друга непосредственно. Как следствие этого, образец можно моделировать только атомами поверхностного слоя. Дефекту же типа вакансии соответствует отсутствие одного такого атома. Ниже предполагается, что наличие дефекта не

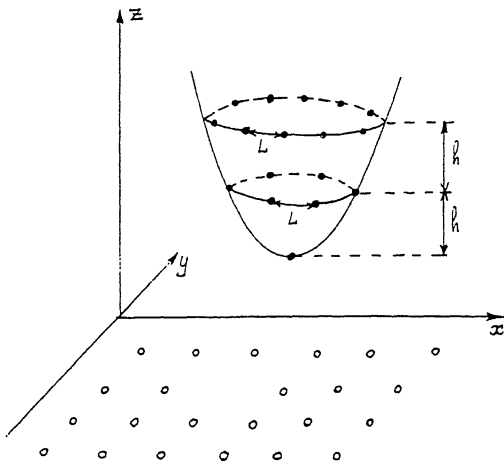


Рис. 1. Схематическое изображение атомов на поверхности острья АСМ и образца.

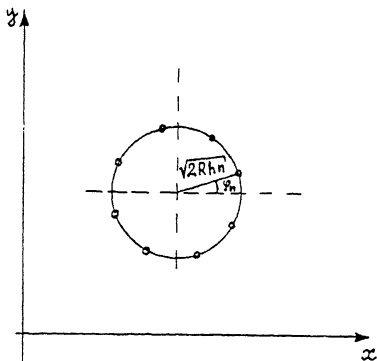
приводит к значительной релаксации решетки и расстояние между близкими к вакансии атомами приблизительно такое же, как и между удаленными (отметим, что если это не так, то методом АСМ легко установить фактическую величину межатомных расстояний вблизи дефекта).

При сканировании острья АСМ над поверхностью в диапазоне сил отталкивания уже нельзя моделировать острие идеальным параболоидом вращения, как это делалось, например, в работах [2, 3]. Необходимо рассматривать острие как конфигурацию из отдельных атомов, расположенных на поверхности параболоида вращения  $z = (x^2 + y^2) / 2R + d$ , где  $R$  — радиус кривизны острья,  $d$  — высота острья над плоскостью образца, совпадающей с плоскостью  $(x, y)$  (см. рис. 1).

Более детально будем «строить» поверхность острья из атомов следующим образом. Пусть на кончике острья находится один атом (нулевой слой). Первый слой атомов находится на высоте  $h$  над нулевым, где  $h$  — расстояние между решеточными плоскостями для кристаллов или просто межатомное расстояние. На такой же высоте над предыдущим находится и каждый следующий слой. Число атомов, расположенных в  $n$ -ом слое на поверхности острья, равно

$$N_n = \left[ \frac{2\pi\sqrt{2Rh_n}}{L} \right], \quad (2)$$

Рис. 2. Расположение атомов в  $n$ -ом поверхностном слое острья АСМ.



где  $L$  — характерное расстояние между атомами в слое (для аморфных веществ  $L=h$ ), квадратные скобки означают взятие целой части числа.

Зададим теперь положение атомов на поверхности острья в системе координат  $x, y, z$  (рис. 1). Пусть атом  $n$ -го слоя острья, имеющий максимальное значение  $x$ , ориентирован под углом  $\varphi_n$  к оси  $x$  относительно вертикальной оси, проходящей через вершину острья (см. рис. 2). При разных  $n$  углы  $\varphi_n$ , вообще говоря, различны. Для удобства рассмотрим случай, когда атом последующего слоя находится между двумя атомами предыдущего в плоскости  $(x, y)$ , т.е. когда, например,  $\varphi_2 = \varphi_1 + \pi/N_1$ . Как показывают численные расчеты, та или иная фиксация величин  $\varphi_n$  не сказывается сколь-нибудь существенно на качественном поведении линий постоянной силы. Так, для дивакансии (см. ниже) при  $N_1 = 6$  переход от  $\varphi_1 = 0$  к наибольшему возможному значению  $\varphi_1 = \pi/6$  изменяет  $z$  координату точек на линиях постоянной силы в областях быстрого изменения  $z$  на (10–30)% и практически не изменяет — вблизи экстремумов.

Окончательно для  $n$ -го слоя легко получить следующие выражения координат атомов, находящихся на поверхности острья:

$$\begin{aligned} x &= X + \sqrt{2Rh_n} \cos \left( \frac{2\pi m}{N_n} + \varphi_n \right), \\ y &= Y + \sqrt{2Rh_n} \sin \left( \frac{2\pi m}{N_n} + \varphi_n \right), \end{aligned} \quad (4)$$

$$z = d + nh, \quad \varphi_n = \varphi_{n-1} + \pi/N_{n-1}, \quad m = 1, \dots, N_n,$$

где  $x, y$  — координаты кончика острья АСМ.

Следует отметить, что указанным алгоритмом можно задать практически любое острие АСМ, имеющее как кристаллическую, так и аморфную структуру, варьируя лишь величины  $h, L, \varphi_1, \varphi_2 \dots \varphi_n$ .

Подобно [14–16] запишем теперь выражение для силы, возникающей в описанной конфигурации вследствие потенциала (1). Представляющую интерес в методе АСМ проекцию силы отталкивания на ось  $z$  можно выразить через частную производную от потенциала (1) по  $z$ , просуммировав затем аддитивно полученный результат по атомам поверхностей острья и образца. В итоге получаем:

$$F_z = \alpha \sum_{(x, y, z)} \sum_{(\bar{x}, \bar{y}, 0)} \frac{12z}{r^{14}}, \quad (5)$$

где  $r^2 = (x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2$ ,  $(x, y, z)$  – координаты атомов на поверхности острия АСМ, а  $(\bar{x}, \bar{y}, 0)$  – координаты атомов поверхности образца. Следует отметить, что в (5) дают заметный вклад лишь те атомы острия и образца, которые находятся в непосредственном контакте. Поэтому здесь, в отличие от [4], где рассматривались непрерывные тела, допустимо формально распространять параметризацию (1) на удаленные атомы.

Теперь можно перейти к моделированию АСМ изображений интересующей нас поверхности. Учитывая тот факт, что АСМ изображение представляет собой набор линий постоянной силы, получим его как результат решения уравнения

$$F_z(x, y, z) = F_0, \quad (6)$$

где  $F_z(x, y, z)$  – сила (5), рассматриваемая как функция координат кончика острия АСМ,  $F_0$  – сила, при которой производится сканирование.

Чтобы продемонстрировать возможности метода АСМ, выберем труднообнаруживаемый дефект – единичную вакансию, т.е. отсутствие всего одного атома в узле решетки. Для определенности примем, что межатомное расстояние в решетке и в острие равно 3 Å, начальная высота сканирования  $d_0 = 1.5$  Å, сила, при которой производится сканирование,  $F_0 = 10^{-8}$  N (это соответствует  $\alpha \cong \cong 1.6 \cdot 10^{-7}$  N · Å<sup>13</sup>), эффективный радиус кривизны острия  $R = 5$  Å. Будем проводить сканирование участка поверхности вблизи дефекта вдоль оси  $x$  со смещением на 1.5 Å по оси  $y$  после каждого прохода. Результаты численного расчета линий постоянной силы приведены на рис. 3, а–в. Как видно из рисунка, характер линий постоянной силы соответствует расположению атомов в решетке. При этом влияние дефекта сказывается практически только при сканировании непосредственно над слоем атомов, содержащих дефект.

Пример единичной вакансии недостаточно полно иллюстрирует развитый формализм, поскольку острие АСМ не опускалось достаточно глубоко в области, где отсутствует атом решетки, так что характер линий постоянной силы фактически определяется взаимодействием с атомами поверхности единственного атома на кончике острия. В качестве другого примера рассмотрим линии постоянной силы при сканировании острия АСМ над дивакансией, т.е. над дефектом, состоящим в отсутствии двух последовательных атомов решетки. Результаты численного расчета по (4)–(6) при тех же значениях параметров, что и для вакансии, приведены на рис. 3, г. Здесь, кроме того, положено  $\mathcal{U}_i = 0$  (как уже отмечалось выше, изменение значения  $\mathcal{U}_i$  не приводит к каким-либо существенным

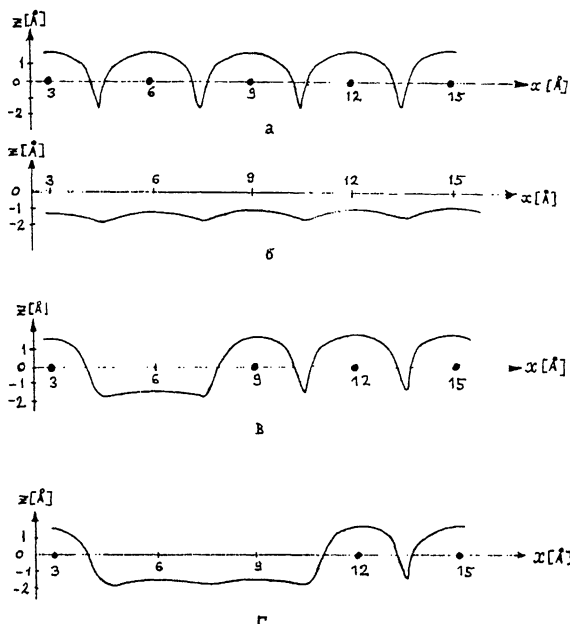


Рис. 3. Линии постоянной силы при сканировании острья АСМ над рядом атомов решетки, не содержащих дефектов (а), между двумя рядами атомов (б) и над рядами, содержащими дефекты типа вакансии при  $x = 6 \text{ \AA}$  (в) и дивакансии при  $x_1 = 6 \text{ \AA}$ ,  $x_2 = 9 \text{ \AA}$  (г).

отличиям). В данном случае имеет место значительное опускание острья в месте расположения дивакансии и определенный вклад в значение силы (5) вносит взаимодействие атомов решетки с атомами первого слоя на поверхности острья. При сканировании над дивакансией линия постоянной силы четко воспроизводит ее профиль.

Как следует из результатов проведенных модельных расчетов, АСМ-изображение надежно фиксирует труднообнаружимые другими методами точечные дефекты. По характеру аномалии на линии постоянной силы над дефектом легко определить его геометрические характеристики, что открывает возможности для диагностики методом АСМ свойств практически любых дефектов на поверхности материалов.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] B i n n i g G., Q u a t e C.F., G e r b e r Ch. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 9. P. 936.
- [2] M o i s e e v Yu.N., M o s t e p a n e n k o V.M., P a n o v V.I., S o k o l o v I.Yu. // Phys. Lett. A. 1988. V. 132. N 6, 7. P. 354.

- [3] Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю. // ЖТФ. 1990. Т. 60. В. 1. С. 141-148.
- [4] Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 20. С. 5-11.
- [5] Благоев Е.В., Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 8. С. 87-90; 1992. Т. 18. В. 18. С. 30-36.
- [6] Зеленский В.Ф., Неклюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и распухание металлов. Киев: Наукова думка, 1988. 293 с.
- [7] Суворов А.Л. Автоионная микроскопия радиационных дефектов в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1982. 167 с.
- [8] Инденбом В.Л., Точилин С.Б. // Кристаллография. 1987. Т. 32. В. 3. С. 586-660; ЖЭТФ. 1990. Т. 98. В. 4. С. 1402-1411.
- [9] Van Dyck D. // Micron and Microsc. Acta. 1990. V. 21. N 4. P. 239-242.
- [10] Воронков С.Н., Чуховский Ф.Н. // Металлофизика. 1989. Т. 11. В. 6. С. 52-56.
- [11] Sinha S.K. // Physica B. 1991. V. 174. N 1-4. P. 499.
- [12] Маслова Н.С., Панов В.И. // УФН. 1989. Т. 157. В. 1. С. 185-195.
- [13] Behm R.J. // J. Phys.: Cond. Matter. 1991. Suppl. A-C. P. 117-120.
- [14] Batra I.P., Cirasci S. // J. Vac. Sci. and Technology. 1988. V. 6. N 2. P. 313-317.
- [15] Abraham F.F., Batra I.P. // Surf. Sci. 1989. V. 209. N 1, 2. P. 125-132.
- [16] Girard C., Maghezzi S., Van Labek D. // Surf. Sci. 1990. V. 234. N 1. P. 181-196.

Поступило в Редакцию  
16 февраля 1993 г.