

откуда видно, что при $c_{кр} = 0.15$ $D_{xx} = 0$, т. е. образуется бесконечный кластер из плакетов или макротрещина из микротрещин.

Для ориентированных веществ размеры микротрещины $a \sim 90 \text{ \AA}$ [1], тогда в пересчете на единицу объема

$$c'_{кр} = a^3 c_{кр} = 1.06 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}.$$

Таким образом, при концентрации микротрещин $c'_{кр}$ произойдут образование макротрещины и разрушение твердого тела.

В работе [5] исследована структура бесконечных кластеров, которые возникают при электрическом пробое и растрескивании, для двумерных решеток. Процесс роста трещин численно моделируется на ЭВМ с помощью уравнения Лапласа

$$\nabla(G\nabla u) = 0, \quad (14)$$

где u — перемещение, G — модуль упругости.

Для двумерной решетки микротрещина моделируется связью между соседними узлами.

В рассмотренной нами работе в трехмерном случае микротрещина моделируется гранью, а кинетическое уравнение (1) переходит при $s \rightarrow 0$ в уравнение Лапласа (14).

Необходимо также отметить, что при растяжении вдоль оси Z вещество может стать анизотропным, т. е. $W_x = W_y > W_z$. В этом случае в матрицу $A(0)$ войдет еще функция от отношения W_x/W_z . Нетрудно заметить, что при учете анизотропии решетки критическая концентрация продольных микротрещин уменьшится, что приведет к уменьшению $c_{кр}$.

Список литературы

- [1] Тамуж В. П., Куксенко В. С. Микромеханика разрушения полимерных материалов. Рига, 1978. 294 с.
- [2] Приезжев В. Б., Терлецкий С. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 125—128.
- [3] Марусяк В. И., Фортуна В. В., Сильвеструк А. В. // УФЖ. 1987. Т. 32. № 5. С. 734—740.
- [4] Марусяк В. И., Фортуна В. В., Сильвеструк А. В. // УФЖ. 1989. Т. 34. № 4. С. 125—128.
- [5] Такаяси Х. // Фракталы в физике / Под ред. Я. Г. Синая и И. М. Халатникова. М.: Мир, 1988. С. 249—254.

Черновицкий

государственный университет

Поступило в Редакцию

5 июля 1989 г.

В окончательной редакции

21 ноября 1989 г.

УДК 539.211+541.183.5

© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

АДСОРБЦИЯ ДИСПРОЗИЯ НА ГРАНИ (112) КРИСТАЛЛА МОЛИБДЕНА

Ф. М. Гончар, В. К. Медведев, Т. П. Смерека, Г. В. Бабкин

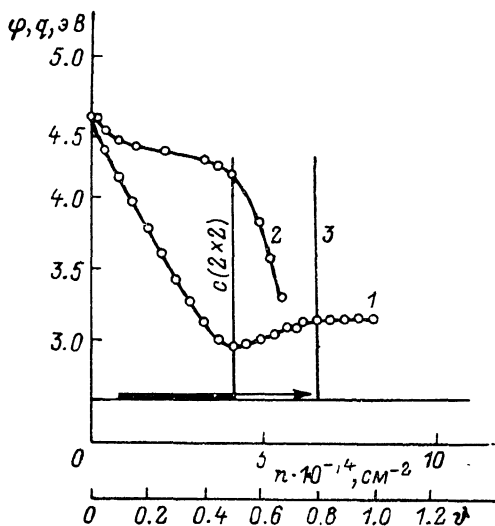
Взаимодействие адсорбированных атомов через электронную систему подложки, как показано в ряде работ [1-7], сильно зависит как от химической природы подложки, так и от электронной структуры адатомов. В частности, в работах [1, 2] обнаружено, что структурные превращения в пленках лантана на одноионных гранях W (112) и Mo (112) существенно отличаются. Это связывалось с различиями в косвенном взаимодействии адатомов La на указанных гранях, имеющих бороздчатую структуру,

где это взаимодействие проявляется наиболее сильно. С целью выяснения этого вопроса в настоящей работе мы исследовали структуру, работу выхода и термическую устойчивость пленок диспрозия на грани Мо (112). Свойства пленок Ду на грани W (112) исследованы в [4, 6]. Методика и вакуумные условия эксперимента были такими же, как и в [1-6].

Результаты структурных исследований свидетельствуют о том, что на грани Мо (112), охлажденной до 77 К, начиная с малых покрытий $\vartheta \approx 0.10$ ($\vartheta = n/n_{Mo}$ — отношение концентрации адатомов Ду к поверхностной концентрации атомов Мо на грани (112), равной $8.3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) появляются немного размытые рефлексy структуры $c(2 \times 2)$. Отжиг пленок диспрозия приводит к увеличению яркости и четкости рефлексов этой структуры. Интенсивность рефлексов структуры $c(2 \times 2)$ для отожженных пленок диспрозия увеличивается с покрытием до $\vartheta = 0.5$, т. е. при этих покрытиях в пленке Ду происходит фазовый переход первого рода — рост островков структуры $c(2 \times 2)$. Последующее увеличение концентрации $\vartheta > 0.5$ приводит к сжатию пленки Ду, имеющей центрированную структуру, вдоль направления атомных бороздок на поверхности грани Мо (112). Монослойное покрытие Ду образуется при $\vartheta = 0.79$. Расстояние между ада-

Зависимость работы выхода φ (1) и теплоты адсорбции q (2) от концентрации n (покрытия ϑ) диспрозия на грани Мо (112).

3 — монослой. Внизу — схема структурных переходов в пленках Ду на грани Мо (112). Жирная горизонтальная линия — область фазового перехода I рода, горизонтальная стрелка — область одномерного сжатия пленки.



томами вдоль бороздок при монослойном покрытии на $\sim 3\%$ меньше межатомного расстояния в массивном Ду.

На рисунке приведены концентрационные зависимости работы выхода φ и теплоты адсорбции q системы Ду—Мо (112). Калибровка концентрационной шкалы диспрозия осуществлялась по времени достижения максимума интенсивности рефлексов структуры $c(2 \times 2)$, когда пленка Ду является сплошной, при непрерывном напылении диспрозия на кристалл. Наблюдается корреляция зависимостей φ и q со структурными превращениями в пленке по мере увеличения концентрации адсорбата. В области роста островков структуры $c(2 \times 2)$ работа выхода системы Ду—Мо (112) изменяется практически линейно с увеличением покрытия. Минимум φ соответствует стехиометрической структуре $c(2 \times 2)$ пленки диспрозия. Теплота адсорбции мало изменяется при $\vartheta < 0.5$, основное ее изменение происходит в области одномерного сжатия пленки Ду при покрытиях сверх оптимального.

Переходя к обсуждению полученных результатов, отметим, что при малых покрытиях наблюдается существенное отличие структур пленок Ду на гранях W (112) [4, 6] и Мо (112), в то время как начальные теплоты адсорбции диспрозия q_0 на этих гранях близки между собой. Адаомы Ду не образуют на грани Мо (112) упорядоченную структуру $p(1 \times 7)$, которая наблюдалась на грани W (112) [4, 6]. Согласно предложенной в [8] модели поверхности переходного металла, в образовании адсорбционной связи и во взаимодействии адатомов через подложку могут принимать участие почти свободные $s(sp)$ -электроны подложки и довольно сильно локализованные, похожие на оборванные связи, d -образные по-

верхностные электронные состояния. Адсорбционная связь редкоземельных элементов, которые обладают большой теплотой адсорбции на поверхности переходных металлов [1-5], должна, по-видимому, содержать значительную часть локализованной d -компоненты. Однако способность d -электронов принимать участие в образовании адсорбционной связи, по-видимому, зависит от степени их локализации, которая уменьшается при переходе от $3d$ - к $4d$ - и $5d$ -переходным металлам. В [2] было выдвинуто предположение, что чувствительность адсорбционной связи к степени локализации d -электронов зависит не только от рода подложки, но и атомной структуры подложки. Она сильнее на гладких и слабее на рыхлых гранях. Этот вывод следует из того, что наблюдалось существенное отличие начальных теплот адсорбции лантана на гладких гранях W (110) и Mo (110) [9], а на гранях W (112) [1], Mo (112) [2] и Re (10 $\bar{1}$ 0) [3], которые имеют бороздчатую структуру, они оказались весьма близкими. Начальные теплоты адсорбции Ду на гранях W (112) [4] и Mo (112) (см. рисунок) также мало отличаются между собой. Эти результаты подтверждают выдвинутое в [2] предположение.

Усиление относительной роли d -электронов подложки в адсорбционной связи атомов редкоземельных элементов должно соответственно сопровождаться усилением их роли во взаимодействии адатомов через подложку. Вследствие своей локализации d -электроны способствуют вполне определенному расположению всех адатомов по отношению к поверхностным атомам подложки, т. е. образованию того или иного структурного состояния. Эти состояния оказались разными для разных бороздчатых граней. На грани Mo (112), начиная с малых покрытий, в пленках La [2] и Ду растут островки структуры $c(2 \times 2)$. На грани W (112) при малых покрытиях редкоземельных элементов образуются структуры, состоящие из линейных цепочек адатомов, а затем — $c(2 \times 2)$ [1, 4, 6]; при адсорбции La на грани Re (10 $\bar{1}$ 0) при таких же покрытиях наблюдались только структуры, состоящие из линейных цепочек адатомов [3]. Отметим, что в пленках Ba [10] и Sr [11], адсорбционная связь которых содержит меньшую долю локализованной d -электронной компоненты, на грани Re (10 $\bar{1}$ 0) образуется структура $c(2 \times 2)$ с эффективными силами притяжения между адатомами. Приведенные результаты показывают, что d -электронная компонента адсорбционной связи на бороздчатых гранях оказывает сильное влияние на взаимодействие адатомов через подложку в ближней зоне.

Важным результатом, полученным в настоящей работе, является тот факт, что начальная теплота адсорбции диспрозия на грани Mo (112) оказалась на ~ 1 эВ меньше, чем q_0 лантана на этой грани [2]. Эти отличия величин теплот адсорбции Ду и La наблюдаются вплоть до оптимальных покрытий. Сверх оптимальных покрытий q резко уменьшается для обоих адсорбатов. Подобный результат получен для этих двух элементов на грани W (112) [1, 4]. Такое различие q как на грани W (112), так и на грани Mo (112) естественно объяснить разным строением электронных оболочек La и Ду, т. е. наличием у La электрона на $5d$ -оболочке, и изложенными в [5, 12] соображениями об изменении электронного состояния атомов редкоземельных металлов при адсорбции, согласно которым уменьшение q_0 адатомов Ду происходит вследствие перехода электрона с $4f$ - на $5d$ -уровень. Подтверждением этого может служить тот факт, что различия значений величин q_0 лантана и диспрозия на гранях W (112) и Mo (112) приблизительно равны, т. е. механизмы изменения электронного состояния адатомов редкоземельных металлов на гранях (112) кристаллов разной химической природы W и Mo, по-видимому, в основном одинаковы.

Список литературы

- [1] Ведула Ю. С., Медведев В. К., Наумовец А. Г., Погорелый В. Н. // УФЖ. 1977. Т. 22. № 11. С. 1826—1834.
 [2] Лозовый Я. Б., Медведев В. К., Смерека Т. П., Палух Б. М., Бабкин Г. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 7. С. 2130—2134.

- [3] Лозовый Я. Б., Медведев В. К., Смерека Т. П., Бабкин Г. В., Палюх Б. М. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 4. С. 1215—1216.
 [4] Гончар Ф. М., Медведев В. К., Смерека Т. П., Лозовый Я. Б., Бабкин Г. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2833—2836.
 [5] Гончар Ф. М., Медведев В. К., Смерека Т. П., Савичев В. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 6. С. 249—251.
 [6] Гончар Ф. М., Смерека Т. П., Палюх Б. М., Лозовый Я. Б. // Физическая электроника. 1989. В. 38. С. 45—51.
 [7] Kolaszkiewicz J., Bauer E. // Surf. Sci. 1985. V. 154. N 2. P. 357—370.
 [8] Knor Z. // Surface and Defect Properties of Solids / Ed. H. W. Roberts, J. H. Thomas. The Chem. Soc., London, 1977. P. 139—178.
 [9] Ведула Ю. С., Гончар В. В., Наумовец А. Г., Федорус А. Г. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 9. С. 1569—1576.
 [10] Медведев В. К., Яковкин И. Н. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 3. С. 669—677.
 [11] Медведев В. К., Яковкин И. Н. // Поверхность. 1982. № 5. С. 112—118.
 [12] Никулин В. К., Потехина Н. Д. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 11. С. 3354—3357.

Львовский государственный университет
им. И. Франко

Поступило в Редакцию
21 ноября 1989 г.

УДК 621.315.592

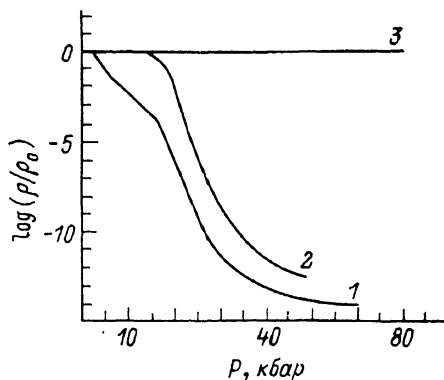
© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

СВЯЗЬ Tl—Me И ПЕРЕХОД ПОЛУПРОВОДНИК—МЕТАЛЛ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ TlMeX₂

Н. Т. Мамедов, Н. К. Мороз

В [1] показано наличие в квазидвумерной подрешетке атомов металлов цепочечных полупроводников TlMeX₂ связи Tl—Me с участием *d*-орбиталей. Вклад *d*-состояний атомов галлия в формирование валентных зон TlMeX₂ обнаружен в [2].

Образование связи Tl—Me возможно при частичном переносе заряда с Tl на ионы Me. При этом максимумы электронной плотности локализованы на одновалентных ионах галлия. В такой схеме связанные состояния Tl—Me формируют верхнюю валентную зону. Зоне проводимости отвечают состояния с равномерным распределением заряда в плоской



Зависимость логарифма относительного изменения электрического сопротивления низкоразмерных полупроводников TlMeX₂ от величины гидростатического давления при комнатной температуре.

подрешетке атомов металлов. Расчеты зонной структуры TlMeX₂ [3, 4], хотя и проводились в локальном приближении, согласуются с таким выводом. Анализ происхождения зонных состояний методом ЛКАО показывает, что нижняя зона проводимости и верхняя валентная зона формируются в основном электронными волновыми функциями атомов Tl и Me.

Двумерная квадратная решетка с чередующимися одно- и трехвалентными ионами в отличие от аналогичной решетки эквивалентных двухзарядных ионов не является металлической (что и реализуется в TlMeX₂). Можно ожидать, что переход в металлическое состояние будет связан с уменьшением расстояния Tl—Me в плоской подрешетке.

На рисунке представлены зависимости логарифма отношения электрического сопротивления ρ под давлением к сопротивлению ρ_0 в отсут-