

УДК 537.533

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ АДсорБАТА НА ПРОЯВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ПОДЛОЖКИ В СПЕКТРАХ МЕДЛЕННЫХ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С УГЛОВЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

В. В. Кораблев, Ю. А. Кудинов, А. И. Агеев

На основе анализа экспериментальных спектров медленных вторичных электронов с угловым разрешением и поверхностных структур системы O_2 —W (110), регистрируемых методом дифракции медленных электронов, показано, что модельные представления, описывающие влияние электронного строения чистого кристалла на энергетические спектры вторичных электронов, успешно могут быть использованы для интерпретации тонкой структуры на спектрах, полученных для системы адсорбат—подложка.

Адсорбция O_2 на поверхности W (110) не приводит к существенному изменению электронной структуры подложки на глубине 10 . . . 30 Å. При этом в отмеченных спектрах структура адсорбата проявляется в открытии новых каналов (из дополнительных участков первой зоны Бриллюэна, не дававших вклад в эмиссию до адсорбции) и также в появлении резонансных особенностей вблизи порогов возникновения новых дифракционных пучков.

1. Спектры медленных вторичных электронов с угловым разрешением (СМВЭУР) несут информацию об электронной структуре приповерхностной области твердых тел, однако возможности извлечения такой информации для систем адсорбат—подложка далеко не выяснены. Адсорбация O_2 на W приводит к изменению формы СМВЭУР [1, 2]. Поэтому была выдвинута гипотеза об изменении электронного строения приповерхностной области подложки для системы O_2 —W по сравнению с таковым для чистого W [2]. Однако в [3, 4] изменения СМВЭУР при адсорбции газов на поверхности монокристаллов Ir и Cu связываются с влиянием на проявление электронного строения подложки процессов поверхностного переброса и поверхностных состояний.

В [5, 6] развит приближенный метод расчета формы СМВЭУР по известной зонной структуре эмиттера и на примере анализа спектров чистых поверхностей монокристаллов W показана эффективность этого метода.

Цель настоящей работы — рассмотреть возможность применения модели, предложенной в [5, 6], к изучению систем адсорбат—подложка на примере анализа механизма формирования СМВЭУР для системы W (110)— O_2 .

2. Выбор в качестве объекта исследований системы W (110)— O_2 диктовался тем, что для W (110), используемого в качестве подложки, имеется расчет СМВЭУР, подтвержденный экспериментом [5], а сверхструктуры, образующиеся при адсорбции O_2 на W (110), известны [7].

Для установления однозначного соответствия СМВЭУР тем или иным структурам адсорбата использовался метод дифракции медленных электронов (ДМЭ); контроль элементного состава поверхности подложки и определение количества адсорбата производились с помощью электронной Оже-спектроскопии (ЭОС). Методика регистрации СМВЭУР описана в [2].

3. На первом этапе исследовалась очищенная поверхность W (110), выдержанная в атмосфере O_2 (парциальное давление O_2 составляло $\approx 5 \cdot 10^{-7}$ Тор) при температуре образца $T=1200$ К до появления дифрак-

ционной картины, приведенной на рис. 1, *a*. Затем проводились кратковременные прогревы (в течение 60–90 с) при $T=1300\div 1800$ К, которые приводили к появлению дифракционных картин, характеризующих структуры (2×2) , (2×1) , а затем структуру (1×1) чистого W. Серия СМВЭУР, соответствующих различным поверхностным структурам O_2 на W (110), приведена на рис. 2. Регистрация спектров производилась при энергии

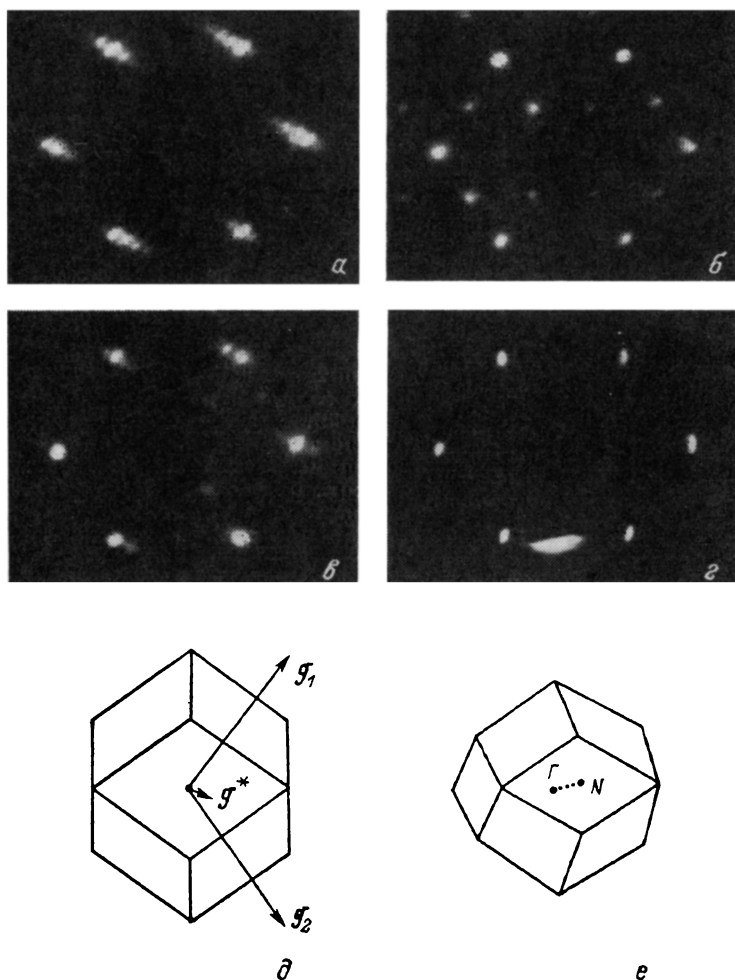


Рис. 1. Картины ДМЭ: для монослойного покрытия O_2 , осажденного на поверхность W (110) при $T=1200$ К (структура *) (*a*); поверхности, характеризующейся суперпозицией структур (2×2) и * (*б*); поверхности, характеризующейся структурой (2×1) (*в*); чистой поверхности W (110) — (1×1) (*г*).

δ — проекция первой зоны Бриллюэна на плоскость (110); g_1 , g_2 — векторы ПОР грани W (110); g^* — вектор ПОР структуры *; e — первая зона Бриллюэна W.

первичных электронов $E_p=500$ эВ. Изменение E_p в диапазоне 70–1500 эВ практически не влияло на структуру СМВЭУР.

Спектры на рис. 2, 1–2, 7, полученные для разных количеств O_2 на поверхности W (110), характеризуются дифракционной картиной рис. 1, *a*. Различия в этих спектрах сводятся лишь к увеличению некогерентного фона (на который накладывается тонкая структура) по мере ослабления контраста картин ДМЭ. При дальнейшем уменьшении концентрации O_2 на поверхности W (110) одновременно с появлением структуры (2×2) в СМВЭУР возникает новый пик при энергии вторичных электронов $E=4.2$ эВ, который сохраняется и при переходе к структуре (2×1) . На

спектрах, характеризующих чистую поверхность W (110), этот пик отсутствует.

4. Для чистой поверхности W (110) форма СМВЭУР определяется электронной структурой W [5]. Так как две наиболее четко выраженные особенности ($E=7.8$ и 10.7 эВ) на СМВЭУР исследованной системы O_2-W сохраняют свое энергетическое положение для всех поверхностных структур, то логично предположить, что электронная структура подложки при адсорбции O_2 продолжает оказывать влияние на СМВЭУР системы O_2-W (110). Причиной, приводящей к изменению формы отмеченных особенностей по сравнению с таковыми для чистой поверхности W (110),

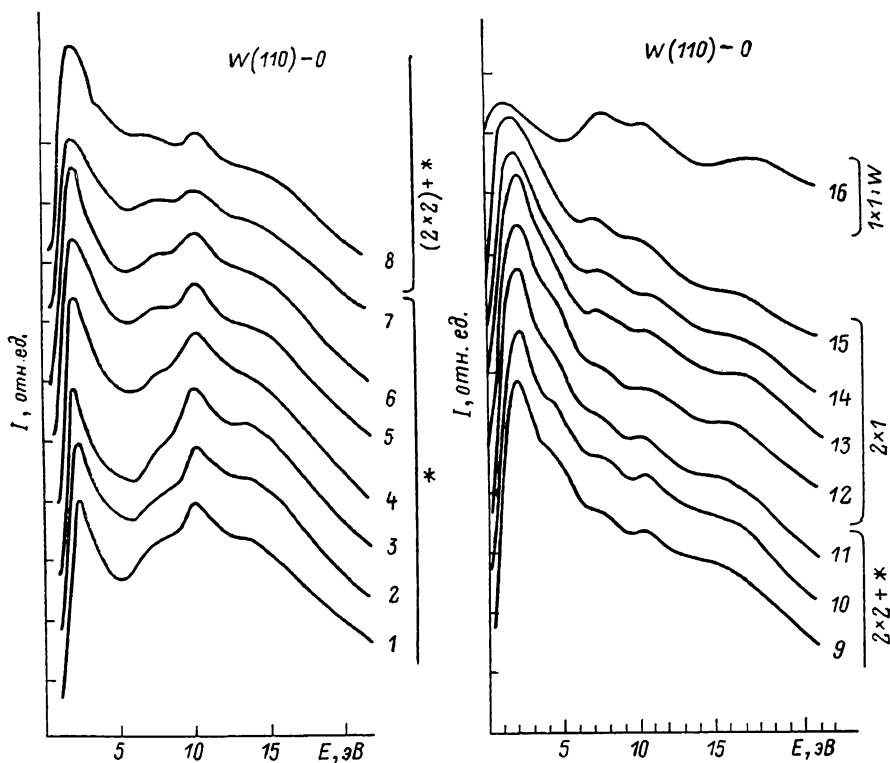


Рис. 2. СМВЭУР для системы O_2-W (110) по мере удаления O_2 .

Кривые 3, 10, 12 соответствуют картинам ДМЭ, приведенным на рис. 1, а, б, в соответственно.

могут служить процессы поверхностного переброса, т. е. эмиссия электронов с изменением тангенциальной компоненты $k_{||}$ волнового вектора на вектор двумерной поверхностной обратной решетки (ПОР).

Рассмотрим систему O_2-W (110) с покрытием, дающим дифракционную картину, приведенную на рис. 1, а. Для этой поверхностной структуры в отличие от чистой поверхности W (110) (рис. 1, в), характерны новые векторы ПОР (рис. 1, б). Эмиссия по нормали к чистой грани W (110) идет только вдоль линии $\Gamma-N$ первой зоны Бриллюэна (рис. 1, в) и спектр, рассчитанный по модели [5] (рис. 3, 2), хорошо согласуется с экспериментальным. Новые векторы ПОР дают возможность выходить в вакуум по нормали к поверхности электронам из состояний, расположенных на линиях, проекции которых на плоскость поверхности образца совпадают с концами этих векторов. Электроны, эмиттированные из состояний на этих линиях, перераспределяются между несколькими дифракционными пучками. Предположив, что доля электронов, выходящих по нормали к поверхности образца, остается постоянной при изменении E , можно по модели [5] рассчитать вклад в СМВЭУР состояний, расположенных на каждой из отмеченных линий, как это было сделано для линии $\Gamma-N$. Из картин ДМЭ видно, что вероятность дифракции велика лишь для первых несколь-

ких векторов ПОР, поэтому можно ограничиться расчетом СМВЭУР для векторов g^* и $2g^*$ (рис. 1, ∂). Результаты расчетов и сравнение их с экспериментом приведены на рис. 3, 1—5. Из рисунка видно хорошее соответствие результатов для двух наиболее четко выраженных пиков ($E=7.8$ и 10.7 эВ).

Экспериментальные СМВЭУР, соответствующие поверхностным структурам (2×1) и (2×2) , характеризуются сильно сглаженными особенностями на спектрах по сравнению с особенностями, наблюдаемыми на СМВЭУР для чистой поверхности W (110) (рис. 2, 16) и системы O_2 —W (110) (рис. 2, 3), характеризующейся дифракционной картиной, приведенной на рис. 1, a . На основании этих результатов можно сделать вывод о большом сечении некогерентного рассеяния медленных электронов поверхностью, характеризующейся структурами (2×1) и (2×2) . Наличие сильного фона на картине ДМЭ для структуры (2×2) (рис. 2, b), подтверждает этот вывод. В то же время фон некогерентно рассеянных электронов для структуры (2×1) значительно ниже (рис. 2, b). Не исключено, что отражение электронов от внутренней поверхности кристалла с изменением k на вектор ПОР структуры (2×1) , приводящее к суперпозиции волновых функций с сильно отличающимися волновыми векторами, возмущает энергетическое строение подложки, что также может приводить к сглаживанию особенностей СМВЭУР. Для структуры, приведенной на рис. 1, a , этот эффект должен сказываться значи-

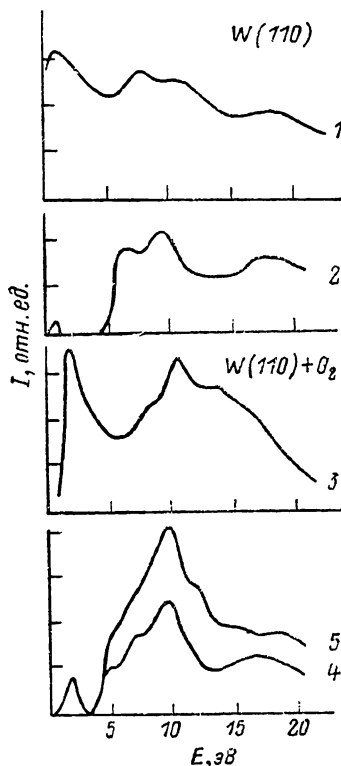


Рис. 3. Экспериментальные (1, 3) и расчетные СМВЭУР; для чистой поверхности W (110) (1) и структуры * (3).

Результаты расчета с учетом эмиссии из состояний, расположенных вдоль линии Γ —N первой зоны Бриллюэна (2) и с учетом вклада в СМВЭУР процессов поверхностного переброса с участием вектора g^* (4) и векторов g^* и $2g^*$ (5).

тельно слабее, так как в этом случае процессы переброса с участием новых векторов ПОР переводят волновой вектор k падающей волны в близкую область первой зоны Бриллюэна. Отметим, что процессам возмущения зонной структуры подложки при наличии адсорбата в рассматриваемом диапазоне энергий препятствуют малые значения сечения рассеяния электронов «назад». Расчет СМВЭУР с участием новых векторов ПОР был проведен и для структур (2×2) и (2×1) . Его результаты показали, что энергетическое положение расчетных особенностей не совпадает с таковыми для эмиссии вдоль линии Γ —N первой зоны Бриллюэна, поэтому процессы поверхностного переброса в этих случаях наряду с некогерентным рассеянием электронов могут объяснять сглаживание особенностей на СМВЭУР.

В рамках модели [1] трудно объяснить происхождение пика на СМВЭУР при $E=4.2$ эВ, наблюдаемого на рис. 2, 8÷2, 13. Можно предположить, что он обусловлен проявлением квазистационарных поверхностных состояний [8], которые не учитываются в модели [5]. Действительно, этот пик наблюдается в СМВЭУР лишь для поверхностных структур (2×1) и (2×2) , а вектор $g_{1/2,0}^*$, общий для обеих структур, приводит к появлению нового дифракционного пучка электронов при $E=5.4$ эВ, что позволяет связать рассматриваемую особенность с поверхностным резонансом вблизи порога появления нового дифракционного пучка.

5. Приведенные результаты и их анализ показывают, что модельные представления, описывающие влияние электронного строения кристалла на СМВЭУР [5], успешно могут быть использованы для интерпретации тонкой структуры СМВЭУР, полученных для систем адсорбат—подложка.

Адсорбция O_2 на поверхности W (110) не приводит к существенному изменению электронной структуры подложки в пределах области формирования СМВЭУР ($\approx 10 \div 30 \text{ \AA}$). При этом в СМВЭУР структура адсорбата проявляется в открытии новых каналов эмиссии (из дополнительных участков первой зоны Бриллюэна, не дававших вклад в эмиссию до адсорбции), а также в возникновении резонансных особенностей вблизи порогов появления новых дифракционных пучков.

Л и т е р а т у р а

- [1] Артамонов О. М., Смирнов О. М., Терехов А. Н. Поверхность, 1983, т. 57, № 8, с. 53—57.
- [2] Кораблев В. В., Кудинов Ю. А. Изв. АН СССР, сер. физ., 1985, т. 49, № 9, с. 1775—1778.
- [3] Zimmer H. G., Westphal D., Kleinerbers K. K., Goldmann A., Richard A. Surf. Sci., 1984, vol. 146, N 2, 3, p. 425—437.
- [4] Mack J. U., Bertel E., Netzer E. P., Lloyd D. R. Z. Phys. B, 1986, vol. 63, N 1, p. 97—108.
- [5] Кораблев В. В., Кудинов Ю. А., Сысоев С. Н. ФТТ, 1986, т. 28, № 9, с. 2648—2654.
- [6] Кораблев В. В., Кудинов Ю. А., Сысоев С. Н. ФТТ, 1987, т. 29, № 3, с. 702—705.
- [7] Городецкий Д. А., Мельник Ю. П., Ясько А. А. УФЖ, 1967, т. 22, № 6, с. 969—973.
- [8] McRae E. G. Rev. Mod. Phys., 1979, vol. 51, N 3, p. 290—304.

Ленинградский политехнический
институт им. М. И. Калинина
Ленинград

Поступило в Редакцию
9 октября 1987 г.