

АНИЗОТРОПИЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЕВОГО ИСПАРЕНИЯ МЕТАЛЛОВ

И.М.Михайловский, В.А.Ксенофонтов, Т.И.Мазилова

*Национальный научный центр, Харьковский физико-технический институт
310108 Харьков, Украина*

Поступила в редакцию 21 февраля 1997 г.

Методами полевой ионной микроскопии и компьютерного моделирования проанализирована микротопография поверхности металлов, сформированной низкотемпературным полевым испарением. Показано, что анизотропия полевого испарения и региональное распределение яркости ионно-микроскопического изображения соответствуют конфигурации первых зон Бриллюэна.

PACS: 61.16.Fk, 68.35.Bs

Явление полевого испарения лежит в основе методов полевой ионной микроскопии, атомного зондирования и ряда разработок высокоэффективных источников иона [1, 2]. Несмотря на успехи, достигнутые в понимании этого явления, количественные результаты могут быть получены лишь в немногих случаях. В частности, открытым остается вопрос об анизотропии испарения, ответственной за формирование специфической огранки поверхности в процессе низкотемпературного воздействия сильных электрических полей. Это существенно затрудняет расшифровку ионно-микроскопических изображений поверхности металлов [3, 4]. К настоящему времени основой интерпретации ионно-микроскопических изображений поверхности твердых тел остаются дополненные компьютерными расчетами геометрические модели. В данной работе сообщается о результатах исследований анизотропии полевого испарения. Показано, что микротопография сформированной полевым испарением поверхности в металлах с ОЦК и ГЦК решетками соответствует конфигурации первых зон Бриллюэна.

Изучалась анизотропия низкотемпературного полевого испарения металлов с ОЦК решеткой – вольфрама и ГЦК решеткой – иридия. Исследования проводились в двухкамерном полевом ионном микроскопе с охлаждением образцов до температур в интервале 21–78 К. Давление остаточных газов в рабочей камере микроскопа составляло 10^{-7} – 10^{-6} Па, изображающего газа (гелия) – 10^{-3} Па. Игольчатые образцы с радиусом кривизны 10–50 нм после установки в микроскоп подвергались полевому испарению до сформирования атомногладкой вершины.

Анизотропия полевого испарения проявляется в отклонении конечной формы испарения вершины образца от полусферической, наличии закономерных вариаций локальной напряженности поля и региональной яркости ионно-микроскопического изображения. Определение вариаций локальной напряженности поля осуществлялось по смещению контура постоянной напряженности поля при изменении рабочего напряжения. В качестве реперных напряженностей поля использовались пороговые напряженности низкотемпературного испарения и полевой ионизации изображающего газа [1].

Моделирование ионно-микроскопических изображений осуществлялось в предположении, что в формировании изображения участвуют атомы, центры

которых заключены внутри тонкого приповерхностного слоя. Относительная яркость отображаемых атомов связывалась с диаметром соответствующего ему пятна на модельных изображениях [3]. Предполагалось, что яркость при напряжении лучшего изображения пропорциональна локальной напряженности поля.

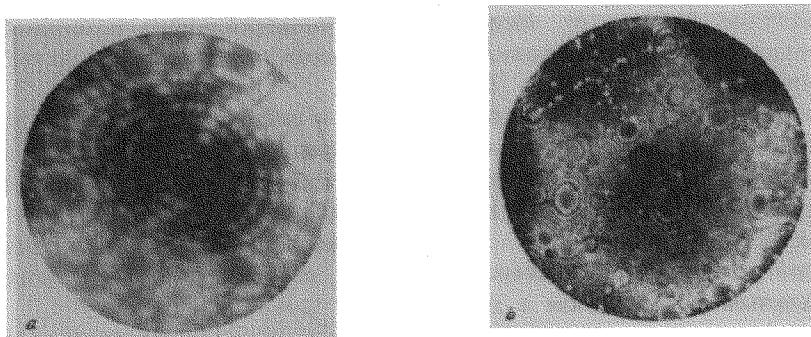


Рис.1. Полевые ионно-микроскопические изображения поверхностей вольфрама (а) и иридия (б), сформулированных низкотемпературным полевым испарением

На рис.1 приведены ионно-микроскопические изображения поверхностей монокристаллов вольфрама и иридия, сформированных низкотемпературным полевым испарением. Интенсивность полевой ионизации распределена вдоль поверхности неоднородно. Яркость изображения повышена на участках с увеличенной локальной кривизной поверхности, а следовательно, и напряженностью поля. На изображениях вольфрама (рис.1а) и других металлов с ОЦК решеткой максимальная яркость наблюдается на участках с повышенной кривизной в окрестности полюсов $\langle 111 \rangle$, минимальная – на уплощенных участках вблизи полюсов $\langle 110 \rangle$. Кривизна поверхности максимальна на участках между полюсами $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. В процессе низкотемпературного полевого испарения иридия (ГЦК решетка) формируются уплощения в окрестности граней $\{100\}$ и $\{111\}$ (рис.1б). Линии с максимальной напряженностью испаряющего поля проходят через полюса $\langle 113 \rangle$, $\langle 012 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$.

Для описания процесса испарения в сильных электрических полях обычно используются различные модификации моделей, развитых Мюллером [1] и Гомером и Свенсоном [5]. Первая рассматривает полевое испарение как удаление иона металла через пониженный полем барьер сил изображения, вторая – как переход из атомного в ионное состояние на критическом расстоянии перезарядки. В рамках этих моделей удовлетворительно описывается поведение испаряемых ионов в вакууме вблизи электронной поверхности. В работе [6] показано, что полевое испарение контролируется двумя потенциальными барьерами, один из которых расположен в приповерхностном слое металла (под эффективной электронной поверхностью), второй – барьер Шоттки – вне его. При низких температурах преодоление внутреннего барьера происходит в результате смещения атомов из положения равновесия, приблизительно равного длине экранирования электрического поля.

Анализ результатов теоретических исследований сил связи, характерных для процессов адгезии, адсорбции [7] и полевого испарения [8, 9], показал, что существует универсальный потенциал взаимодействия, описывающий эти явления. В потенциале в качестве единицы длины используется длина экранирования Томаса – Ферми λ . Дезинтеграция в этих процессах под действием внешних сил происходит при смещении атомов из положения равновесия на $\lambda\xi$, где ξ – коэффициент порядка единицы, что удовлетворительно согласуется с результатами работы [6]. Использование универсального потенциала в теории полевого испарения позволило также количественно описать термо-полевые характеристики этого явления [8].

В соответствии с моделью, предложенной в работе [9], низкотемпературному (безактивационному) полевому испарению предшествует смещение параллельных поверхности атомных слоев из положения равновесия a_m , которому соответствует обращение в нуль второй производной энергии E по нормальной к поверхности координате a . Для описания конфигурации внутреннего барьера, контролирующего полевое испарение, воспользуемся полуэмпирическим универсальным потенциалом в форме [10]

$$E_0(a) = \Delta E_0 E^*(a^*), \quad (1)$$

где

$$E^*(a^*) = -(1 + \beta_a^*) \exp(-\beta_a^*), \quad (2)$$

$a^* = (a - a_m)/\lambda$ и β – безразмерный коэффициент, приблизительно равный единице.

Плотность пондеромоторных сил электрического поля σ , вызывающих смещение поверхностного атомного слоя на величину $a - a_m$, равна

$$\sigma = \Delta E / \lambda \beta^2 a^* \exp(-\beta a^*). \quad (3)$$

Пороговая напряженность поля, при которой происходит безактивационное испарение монослоя атомов, соответствует условию $d^2E/da^2 = 0$ и равна

$$F = 2(2\pi \Delta E / (e\lambda)\beta)^{1/2}. \quad (4)$$

Для определения энергии испарения монослоя ΔE воспользуемся соотношением [7]

$$\frac{d^2E}{da_{a=a_m}^2} = \frac{C_{11}}{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n})D}, \quad (5)$$

где C_{11} – модуль растяжения в направлении \mathbf{n} , нормальному к поверхности, \mathbf{m} – единичный вектор нормали к плотноупакованной кристаллографической плоскости и D – межплоскостное расстояние. Скалярное произведение $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n})$ определяет величину компоненты пондеромоторных сил, обуславливающей растяжение вдоль нормали \mathbf{n} .

Из соотношений (4) и (5) следует, что минимальная пороговая напряженность испаряющего поля должна наблюдаться в области вывода на поверхность полюсов плотноупакованных плоскостей, характеризующихся максимальными значениями D . В соответствии с экспериментом, на этих участках в процессе низкотемпературного испарения формируются уплощения, проявляющиеся по пониженной яркости ионно-микроскопического изображения (рис.1). В общем случае, когда \mathbf{m} и \mathbf{n} не параллельны, целесообразно использовать выражение

$(m \cdot n)D = (G \cdot n)/G^2$, где G – вектор обратной решетки. Из соотношений (1), (4) и (5) получим выражение для пороговой напряженности поля безактивационного испарения:

$$F = 2 \left[\frac{2\pi\lambda C_{11}}{\beta e} \frac{G^2}{G \cdot n} \right]^{1/2}. \quad (6)$$

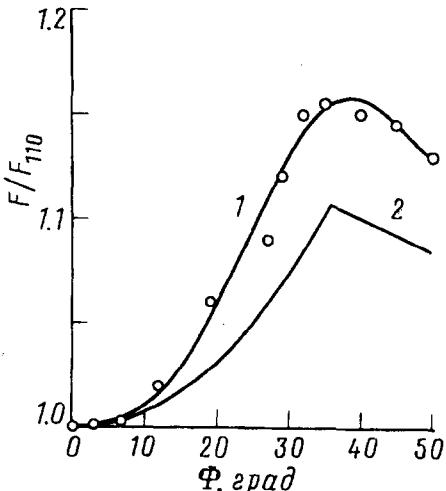


Рис.2. Ориентационная зависимость напряженности безактивационного полевого испарения вольфрама в окрестности полюса [110]

На рис.2 приведены экспериментальные (1) и расчетные (2) кривые зависимости отношения F/F_{110} от угла ϕ между направлениями [110] и n , где F_{110} – напряженность поля над гранью [110] вольфрама. Здесь векторы n принадлежат кристаллографическому поясу [110]. при построении кривой 2 выбирались векторы G , соответствующие минимальным значениям F , определяемым из соотношения (6). Из рис.2 следует, что характер анизотропии низкотемпературного полевого испарения удовлетворительно описывается аналитической моделью. Расчетные кривые, однако, дают заниженные значения абсолютных значений фактора анизотропии. Более детальное соответствие может быть достигнуто, по-видимому, за счет учета особенностей испарения атомов с изломов поверхностных ступенек.

Плотность пондеромоторных сил при пороговой напряженности поля $F^2/8\pi$, как следует из соотношения (6), обратно пропорциональна проекции вектора обратной решетки на вектор нормали к поверхности. Таким образом, испарение полусферической поверхности образцов в рамках рассматриваемой модели осуществляется путем удаления полем наиболее плотноупакованных поверхностных плоскостей с минимальными значениями G . Поверхность, характеризующая анизотропию локальных механических напряжений σ , возникающих при полевом испарении, представляет собой многогранник, построенный из плоскостей, перпендикулярных наименьшим векторам обратной решетки G . В ОЦК-металлах такой многогранник представляет собой ромбический додекаэдр, образованный кристаллографическими плоскостями {110}; в ГЦК-металлах – усеченный октаэдр, ограниченный плоскостями {111} и {100}. Эти многогранники геометрически подобны соответствующим первым зонам Бриллюэна. Микротопография поверхности, формируемая полевым испарением, может быть описана такими многогранниками со слаженными ребрами. На рис.3 приведе-

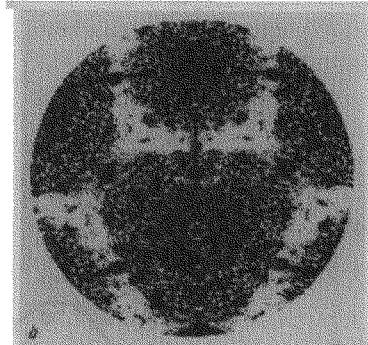
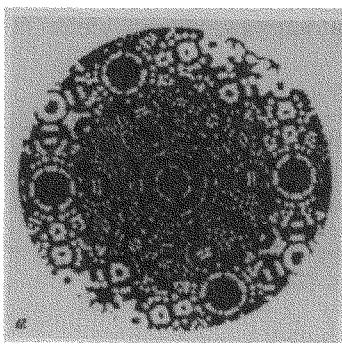


Рис.3. Компьютерные модели ионно-микроскопических изображений, сформированных низкотемпературным полевым испарением металлов с ОЦК (а) и ГЦК (б) решетками. Параметры моделирования: радиусы кривизны 31.6 и 38.3 нм, толщины изображаемых оболочек $1.2 \cdot 10^{-2}$ и $9.5 \cdot 10^{-3}$ нм, ориентации кристаллитов [110] и [131] для ОЦК и ГЦК решеток соответственно

ны компьютерные модели полевых ионных изображений металлов с ОЦК (а) и ГЦК (б) решетками, построенные с учетом анизотропии напряженности испаряющего поля, определяемой соотношением (6). Сопоставление компьютерных и реальных ионно-микроскопических изображений показывает, что региональное распределение яркости ионно-микроскопических изображений, отражающее анизотропию низкотемпературного полевого испарения, соответствует конфигурации первых зон Бриллюэна.

Авторы признательны В.И.Герасименко и В.В.Слезову за полезные обсуждения. Работа выполнена при частичной поддержке Государственного комитета Украины по вопросам науки и технологий: Фондов фундаментальных исследований (проект 2.3/933) и государственных научно-технических программ (проект 5.42.06/040 и 7.02.05/093).

-
1. Э.В.Мюллер, Т.Т.Цонг, *Полевая ионная микроскопия, полевая ионизация и полевое испарение*, М.: Наука, 1980. (E.W.Muller and T.T.Tsong, *Field ion microscopy, field ionization and field evaporation*, Pergamon Press, 1973).
 2. М.Миллер, Г.Смит, *Зондовый анализ в атомионной микроскопии. Принципы и приложения в материаловедении*, М.: Мир, 1993. (M.K.Miller and G.D.W.Smith, *Atom probe microanalysis: Principles and Applications to Materials Problems*, Oak Ridge National Laboratory, 1990).
 3. А.Л.Суворов, *Структура и свойства поверхностных атомных слоев металлов*, М.: Энергоатомиздат, 1989.
 4. V.A.Ksenofontov and I.M.Mikhailovsky, *Abstracts 43rd International Field Emission Symposium, Moscow*, 1996, p.59.
 5. R.Gomer and L.W.Swanson, *J. Chem. Phys.* **38**, 1613 (1963).
 6. И.М.Михайловский, Ж.И.Дранова, В.А.Ксенофонтов и др., *ЖЭТФ* **76**, 1309 (1979).
 7. J.H.Rose, J.R.Smith, and J.Ferrante, *Phys. Rev. B* **28**, 1835 (1983).
 8. N.Shima and M.Tsukada, *Surf. Sci.* **194**, 312 (1988).
 9. E.R McMullen and J.P.Perdew, *Phys. Rev. B* **36**, 2598 (1987).
 10. J.H.Rose, J.Ferrante, and J.Smith, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 675 (1981).