

## ДЕФЕКТЫ ПОВЕРХНОСТИ И КОЛЛЕКТИВНЫЙ ХАРАКТЕР ДИФфуЗИИ В СИСТЕМЕ Li – W (011)

Ю.С.Ведула, И.Ф.Люксюгов, А.Г.Наумовец, В.В.Поплавский

Исследовано влияние малого количества искусственно созданных дефектов (адсорбированный кислород) на поверхностную диффузию лития на грани (011) W. Получены данные, свидетельствующие о коллективном характере диффузии. Результаты обсуждаются на основе представлений о солитонном механизме диффузии.

При малом отклонении концентрации адсорбированных атомов (адаомов) от стехиометрического значения, соответствующего соизмеримому с подложкой 2-мерному кристаллу, в этом кристалле может возникать сверхрешетка солитонов (доменных стенок)<sup>1,2</sup>. Солитоны представляют собой линейные области сжатия или растяжения пленки, ширина которых определяется энергией латерального взаимодействия адаомов и потенциальным рельефом подложки. На основе экспериментальных данных<sup>3</sup> в работе<sup>4</sup> было высказано предположение о том, что солитоны могут являться переносчиками массы в процессе поверхностной диффузии, придавая ему специфический коллективный характер.

Отдельный солитон находится в потенциальном рельефе, который аналогичен рельефу Пайерлса для дислокаций<sup>5,6</sup> (режим пиннинга подложкой). Эта ситуация сохраняется вплоть до некоторого критического расстояния между солитонами, при котором их сверхрешетка "отрывается" от пайерлсовского рельефа. На идеальной подложке это привело бы к безактивационному переносу массы солитонами, однако при наличии поверхностных дефектов, закрепляющих солитоны (рис.1), диффузия и в этом случае будет носить активационный характер (режим пиннинга дефектами). Энергия активации при этом должна определяться энергией срыва солитона с дефекта. В случае сильно связанных с подложкой дефектов энергия активации будет порядка энергии разрыва солитона, причем она не будет зависеть от концентрации дефектов и слабо меняться в зависимости от их природы.

Имеющейся в пленке градиент концентрации адаомов приводит к градиенту давления в упругой решетке солитонов. В результате на солитон в точке закрепления на дефекте действует дополнительная сила в направлении диффузии. С уменьшением концентрации дефектов растет величина этой силы, а значит и вероятность срыва с дефекта, что приводит к росту коэффициента диффузии  $D$ . Так как энергия активации не изменяется, рост  $D$  должен происходить за счет предэкспоненциального фактора  $D_0$ .

Для проверки этих предсказаний теории<sup>4</sup> мы в данной работе изучили зависимость коэффициента диффузии в 2-мерном кристалле вблизи точки соизмеримости от концентрации искусственно создаваемых на поверхности дефектов: Исследовалась диффузия лития на грани (011) вольфрама, на которой в качестве дефектов были адсорбированы адаомы кислорода. При температурах эксперимента коэффициент диффузии кислорода примерно на 10 порядков ниже коэффициента диффузии лития<sup>7,8</sup>, так что адаомы кислорода могут рассматриваться как практически неподвижные дефекты. Степень покрытия поверхности кислородом  $\theta_k$  регулировалась температурой прогрева кристалла  $T_n$ , предварительно покрытого кислородом. Величина  $\theta_k$  оценивалась по изменению работы выхода. Исследования были проведены при  $\theta_k$ , указанных на рис.2.

Методика исследования поверхностной диффузии описана в<sup>3,9</sup>. Диффузия исследовалась при монослойном покрытии лития  $\theta = 1$ , при котором образуется соизмеримая с подложкой структура  $C(1 \times 1)$ <sup>9</sup>. На рис.2 представлены температурные зависимости коэффициента диффузии  $D = D_0 \exp(-E_d/kT)$  (прямые Аррениуса) при различных значениях  $\theta_k$ . Рассчитанные по ним значения  $D_0$  и  $E_d$  приведены на врезке рис.2 (для  $\theta_k \lesssim 0,001$  приведены данные, относящиеся к низкотемпературной области). При уменьшении  $\theta_k$  от 0,015 до 0,001 величина  $E_d$  в пределах точности опыта не изменяется, а  $D_0$  возрастает на 2 порядка. Интересно, что

даже при  $\theta_k \lesssim 0,001$  коэффициент диффузии при низких  $T$  заметно ниже, чем на чистой поверхности, хотя в области высоких  $T$  уже наблюдается переход к параметрам, характерным для чистой поверхности (прямая 4). Роль стопоров на бескислородной поверхности играют "собственные" дефекты – ступени, вакансии и т.д., так что в разных температурных интервалах зависимости  $\ln D$  на рис.2 значения  $E_d$  и  $D_0$  определяются, по-видимому, разными типами стопоров.

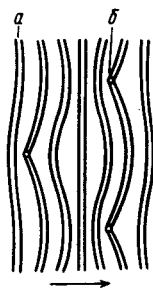


Рис.1. Деформация решетки солитонов в случае пиннинга на дефектах. Стрелкой указано направление диффузии: а – солитон, б – дефект.

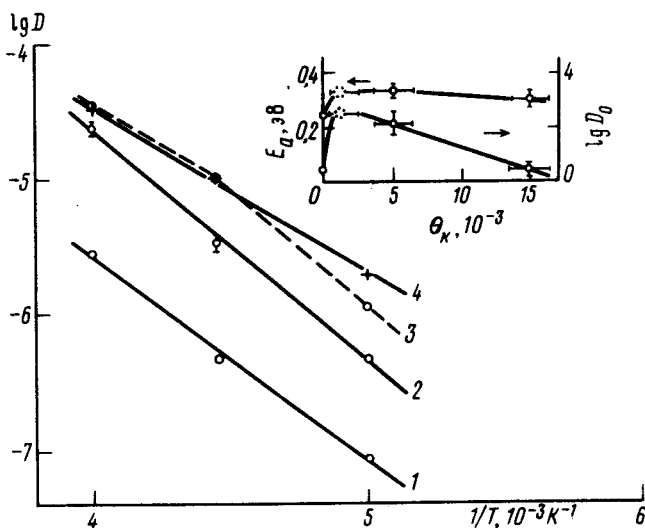


Рис. 2

Рис.2. Прямые Аррениуса для диффузии лития при различных покрытиях кислорода; 1 –  $\theta_k \approx 0,015$ ,  $T_n = 1900$  К; 2 –  $\theta_k \approx 0,005$ ,  $T_n = 1950$  К; 3 –  $\theta_k \approx 0,001$ ,  $T_n = 2000$  К; 4 –  $\theta_k = 0$ ,  $T_n = 2300$  К ( $\theta_k = 1$  соответствует концентрации адатомов кислорода =  $14,1 \cdot 10^{14}$  см $^{-2}$ ). Справа сверху зависимости  $E_d$  и  $D_0$  от  $\theta_k$ .  $D$  и  $D_0$  в единицах см $^2$ с $^{-1}$

Собственные дефекты поверхности, в принципе, могли бы привести к неравномерному распределению адатомов кислорода по поверхности – например, к их скопленению у ступеней представляющих собой линейные дефекты. Однако данные структурных исследований<sup>10</sup> показывают, что этот эффект выражен слабо. К такому же выводу приводят оценки, основанные на данных о разности теплот адсорбции кислорода у ступени и на террасе<sup>11</sup> и о коэффициенте диффузии кислорода на W (011)<sup>7,8</sup>.

Таким образом, сильные изменения  $D_0$  обуславливаются адатомами кислорода, концентрация которых в  $10^2 - 10^3$  раз меньше, чем концентрация диффундирующих атомов лития, и которые располагаются на расстояниях по крайней мере 10 – 15 постоянных решетки. Этот факт свидетельствует в пользу модели, согласно которой диффузия в изученной системе носит коллективный характер. Полученные зависимости  $E_d$  и  $D_0$  от концентрации дефектов согласуются с предсказаниями теории<sup>4</sup> для солитонного механизма поверхностной диффузии.

#### Литература

1. Frank F.C., Van der Merwe J.H. Proc. Roy., Soc., London, 1949, 198, 205, 216.
2. Покровский В.Л., Таланов А.Л. ЖЭТФ, 1980, 78, 269.
3. Ведула Ю.С., Лобурец А.Т., Наумовец А.Г. ЖЭТФ, 1979, 77, 773.
4. Люксютов И.Ф., Покровский В.Л. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, 343.
5. Aubry S. Solitons and Condensed Matter Physics ed. A.R.Bishop, T.Schneider, Springer, Heidelberg, 1979, 264.
6. Pokrovsky V.L. J. de Phys., 1981, 42, 761.
7. Butz R., Wagner H. Surf. Sci., 1977, 63, 448.
8. Chen J.R., Gomer R. Surf. Sci., 1979, 79, 413.
9. Ведула Ю.С., Лобурец А.Т., Наумовец А.Г. Препринт инст. физики №12, 1980.

10. *Engel T., von dem Hagen T., Bauer E.* Surf. Sci., 1977, **62**, 361.

11. *Wagner H.* Solid Surface Physics. Springer, Heidelberg, 1979, 151.

Институт физики

Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию

25 июня 1982 г.

---