

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АМПЛИТУДЫ КОЛЕБАНИЙ ПОВЕРХНОСТНЫХ АТОМОВ МЕТОДОМ АВТОИОННОЙ МИКРОСКОПИИ

И. М. Михайловский, Ж. И. Дранова.

Предложен метод определения амплитуды колебания поверхностных атомов на ступеньках плотноупакованных плоскостей. Амплитуда колебаний рассчитывается по скорости низкотемпературного испарения металлов в сильных электрических полях, измеренной с помощью автоионного микроскопа.

Для изучения колебаний атомов на поверхности твердых тел обычно используются физические характеристики кристаллов, непосредственно зависящие от амплитуды отклонения поверхностных атомов от положения равновесия. Количественно динамика поверхностных атомов изучалась методами дифракции медленных электронов [1, 2] и эффекта Мессбауэра на резонансных ядрах, расположенных в поверхностном слое кристалла [3]. В этих экспериментах и большинстве теоретических работ [4 — 6] исследовались колебания атомов, лежащих в плотноупакованных плоскостях.

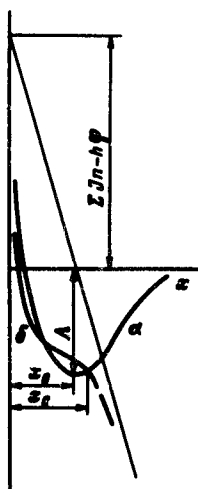


Рис. 1. Диаграмма потенциальной энергии поверхностного атома (а) и иона (б) в электрическом поле

В настоящей работе показано, что метод автоионной микроскопии позволяет определить амплитуды колебаний атомов, расположенных на ступеньках плотноупакованных атомных граней. Получение таких данных представляет особый интерес, так как колебания этих атомов в значительной мере определяют кинетику испарения и роста кристаллов, адсорбции, коррозии и ряда других явлений на поверхности кристаллов.

Амплитуда колебаний поверхностных атомов на изломах в настоящей работе определяется на основе автоионномикроскопических данных о скорости низкотемпературного испарения металла в сильных электрических полях.

Скорость испарения атомов контролируется величиной потенциального барьера Q_n (рис. 1), равного разности энергий поверхностного атома в равновесном положении x_0 и в точке x_c пересечения атомной (а) и ионной (б) кривых потенциальной энергии [7]:

$$Q_n = \Lambda + J_n - n\phi - (n^2 l^2 / 4x_c) - nEx_c, \quad (1)$$

где Λ — теплота сублимации, J_n — потенциал n -кратной ионизации, ϕ — работа выхода электрона, e — заряд электрона, E — напряженность электрического поля.

При температурах ниже температуры Дебая в общем случае $Q_n \ll \Lambda$, и, следовательно, точка пересечения атомной и ионной кривых лежит вблизи дна ямы ($x_c \approx x_0$). В связи с этим можно пренебречь ангармоническими эффектами и воспользоваться для определения скорости испарения k_e нормальным распределением [8]:

$$k_e(E) = k_0 \exp \left\{ - \frac{[x_c(E) - x_0]^2}{2 \langle x^2 \rangle} \right\}, \quad (2)$$

где $\langle x^2 \rangle$ — средний квадрат нормальной к поверхности компоненты амплитуды колебания атомов; k_0 — константа испарения.

При $x \geq x_c$ ионная кривая приближается к прямой потенциальной энергии иона во внешнем электрическом поле, так что $neEx_c \approx \text{const}$, откуда $dx_c/dE = -x_0/E$, и выражение (2) может быть преобразовано к виду

$$\langle x^2 \rangle = 2 \left(\frac{x_0}{E (d/dE) \ln k_e} \right)^2 \ln(k_0/k_e). \quad (3)$$

Соотношение (3) было использовано для определения $\langle x^2 \rangle$ и температуры Дебая Θ_K атомов монокристаллического вольфрама чистотой 99,95%, расположенных на изломах ступенек плоскостей $\{110\}$. Автоионномикроскопически определялась зависимость скорости испарения k_e в интервале $10^{-3} - 10^{-4}$ ат. сл./сек при 78 К от напряженности электрического поля. Скорости испарения выше 1 ат. сл./сек достигались путем нагружения образцов от высоковольтных импульсных генераторов с длительностями импульсов 0,5; 20; 200 и 700 мксек; измерялись скорости путем подсчета числа импульсов, за время которых испарялся один атомный слой.

Как видно из рис. 2, $\ln k_e$ практически линейно возрастает с E ; чувствительность скорости испарения к напряженности поля $(d/dE) \ln k_e$ равна $39,2 \text{ \AA}/\text{e}$.

Подставляя в (3) $k_e = 1 \text{ ат. сл./сек}$, $E = 5,8 \text{ e/\AA}$, $x_0 = 1,3 \text{ \AA}$ и $k_0 = 5 \cdot 10^{10}$ [7], получим $\sqrt{\langle x^2 \rangle} = 0,041 \text{ \AA}$.

Как известно, при температурах ниже дебаевской наблюдается отклонение от линейной зависимости амплитуды колебаний от температуры T ; при этом амплитуда колебаний оказывается пропорциональной

некоторой "эффективной" температуре T_e [9] такой, что разность $T_e - T$ пропорциональна вкладу в $\langle x^2 \rangle$ нулевых колебаний решетки.

Скорость испарения в электрическом поле может быть представлена в виде

$$k_e(E) = k_0 \exp \left[- \frac{Q_n(E)}{k T_e(T)} \right]. \quad (4)$$

Подставляя полученные экспериментальные значения $k_e(E)$ в (4) и используя данные о зависимости "пороговой" напряженности испаряющего поля, соответствующей скорости испарения $k_e \approx 10^{-2}$ ат. сл./сек, от температуры [10], получим зависимость $T_e(T)$ (рис. 3, кривая 1).

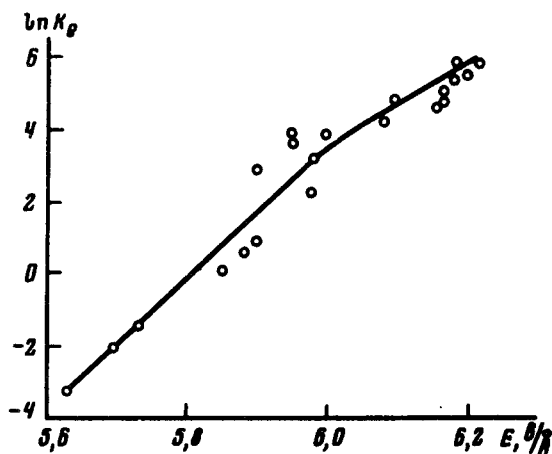


Рис. 2. Зависимость скорости испарения атомов грани (110) вольфрама от напряженности поля

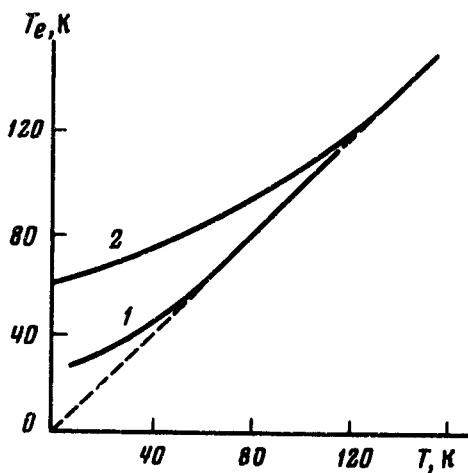


Рис. 3. Зависимость эффективной температуры поверхности на ступеньках (1) и в плоскости (2) (110) от температуры

Для сравнения приведена зависимость $T_e(T)$ для поверхностных атомов вольфрама, лежащих внутри плоскости {110}, рассчитанная по отклонению от прямой линии графика $\langle x^2 \rangle(T)$ в низкотемпературной области. Как следует из рис. 3, при $T = 78$ К вклад нулевых колебаний в $\langle x^2 \rangle$ невелик ($T_e \approx T$), и, следовательно, при определении темпера-

туры Дебая для изломов атомных ступенек применимо высокотемпературное приближение [11]:

$$\Theta_K^2 = \frac{3\hbar^2 T}{mk \langle x^2 \rangle}, \quad (5)$$

где m — масса поверхностного атома.

Подстановка в выражение (5) полученного значения $\langle x^2 \rangle$ дает $\Theta_K = 183$ К. Это значение несколько ниже температуры Дебая Θ_S для атомов, расположенных в плоскости ($\Theta_S = 245$ К [11]), чем, в частности, можно объяснить тот факт, что квантовые эффекты начинают влиять на величину амплитуд колебаний атомов на изломах атомных ступенек при сравнительно низких температурах (см. кривые 1 и 2, рис. 3).

В заключение авторы выражают признательность Р.И.Гарберу за внимание к работе, В.Д.Нацику за полезные обсуждения и В.Б.Кулько за участие в проведении эксперимента.

Физико-технический институт
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
10 июля 1975 г.

Литература

- [1] С.Г.Калашников, О.И.Замша. ЖЭТФ, 9, 1408, 1939.
- [2] J.Aldag, R.M.Stern. Phys. Rev. Lett., 14, 857, 1965.
- [3] J.W.Burton, R.P.Godwin. Phys. Rev., 158, 218, 1967.
- [4] И.М.Лифшиц, Л.Н.Розенцвейг. ЖЭТФ, 18, 1012, 1948.
- [5] В.С.Clark, R.Herman. Phys. Rev., 139, A860, 1965.
- [6] В.И.Пересада, Е.С.Сыркин. ФТТ, 16, 687, 1974.
- [7] Э.Мюллер, Т.Цонь. Автоионная микроскопия, М., изд. Металлургия, 1972.
- [8] И.М.Михайловский. XV Всесоюзная конференция по эмиссионной электронике, Киев, 1973, изд. ИФ АН УССР, стр. 61.
- [9] G.Alefeld. Phys. Rev. Lett., 12, 372, 1964.
- [10] T.Kuroda, H.Yagi, Sh. Wakamura. Mem. Inst. Sci. and Ind. Res., Osaka Univer., 26, 101, 1969.
- [11] А.Марадудин. Дефекты и колебательный спектр кристаллов, М., изд. Мир, 1968.