

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 4

ТВЕРЬ 2012

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации,
проректор по научной работе Тверского государственного технического университета

В.А. Тихомиров

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики пьезо-
и сегнетоэлектриков Тверского государственного университета

Н.Н. Большакова

Редакционная коллегия:

Самсонов Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики
ТвГУ, профессор, д.ф.-м.н. (ответственный редактор);

Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики факультета электронной
техники Северо-Кавказского горно-металлургического института, профессор, д.ф.-м.н.;

Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики
Хакасского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;

Сдобняков Николай Юрьевич – доцент, к.ф.-м.н. (зам. ответственного редактора,
ответственный секретарь);

Базулев Анатолий Николаевич – доцент, к.ф.-м.н.;

Комаров Павел Вячеславович – доцент, к.ф.-м.н.;

Скопич Виктор Леонидович – доцент, к.ф.-м.н.;

Соколов Денис Николаевич – технический редактор.

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и
наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией
В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2012. – Вып. 4. –
364 с.

ISBN 978-5-7609-0560-4

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных
технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ
ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и
экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области
изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и
наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник
предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей
вузов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре теоретической
физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-0560-4

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2012

© Тверской государственный
университет, 2012

УДК 532.6:537.534

ВЛИЯНИЕ СЕГРЕГАЦИИ НА МОРФОЛОГИЮ ПОВЕРХНОСТИ СПЛАВА (100)Cu-4 ат. %Mn

К.Ч. Бжихатлов

*Кабардино-Балкарский государственный университет
Российская Федерация, Нальчик, ул. Чернышевского, 173
kfome@kbsu.ru*

Аннотация: Методом дифракции медленных электронов в интервале $T = 300...875K$ исследовано влияние термостимулированной сегрегации на морфологию поверхности монокристаллического сплава (100)Cu-4 ат. %Mn. По форме и профилю дифракционных рефлексов оценивается совершенство поверхности сплава.

Ключевые слова: дифракция медленных электронов, профиль дифракционного рефлекса, термостимулированная сегрегация, Cu-Mn.

Метод дифракции медленных электронов (ДМЭ) благодаря малой глубине проникновения электронов широко применяется для качественного анализа периодической структуры тонких внешних атомных слоев. Кроме того, анализ профиля распределения интенсивности дифракционного рефлекса позволяет получать информацию о морфологии поверхности (ступеньки, искажения решетки, межфазные границы и др.), которая, в свою очередь, влияет на свойства поверхности. Важно учитывать размеры области поверхности, информацию о которой дает эксперимент. В обычных дифрактометрах эта область составляет ~ 30 нм, что труднодостижимо для электронно-микроскопических методов [1, 2]. Анализ профиля интенсивности выделился в отдельное научное направление - SPA-LEED [3], в котором применяются анализаторы высокого разрешения, но, даже применяя обычное фотометрирование дифракционных рефлексов, можно судить о совершенстве поверхности кристалла.

Бинарная система Cu-Mn интересна тем, что атомы Cu и Mn способны формировать двумерные сплавы с дальним магнитным порядком [4]. При разработке таких структур необходимо учитывать влияние кристаллографического строения и состава подложки, а также внешних условий на свойства двумерного сплава. Целью данной работы было исследование методом ДМЭ влияния термостимулированной сегрегации на атомную структуру и морфологию поверхности монокристаллического сплава Cu-4 ат. %Mn.

Предметом изучения была поверхность грани (100) монокристаллического твердого раствора Cu-4 ат. %Mn. Исследования проводили в условиях сверхвысокого вакуума ($p \sim 10^{-8}$ Па) на электронном спектрометре с четырехсеточным энергоанализатором тормозящего типа

[5]. Источником зондирующих электронов служила электронная пушка, способная формировать монохроматичный первичный пучок с энергией $E_p \sim 50 \dots 2000$ эВ. Угол падения электронов на образец во всех случаях составлял $\sim 25^\circ$. Поверхность монокристалла очищалась с помощью нескольких циклов ионно-аргонного распыления при $E_p \sim 1$ кэВ и угле падения ионов $\sim 45^\circ$. Интенсивность и форму профилей дифракционных рефлексов, наблюдаемых на экране-коллекторе, контролировали с помощью цифровой видеокамеры и соответствующего программного обеспечения. Параметры дифракционных максимумов регистрировали как функцию температуры отжига в диапазоне $T = 295 \dots 875$ K при ступенчатом нагреве и охлаждении в условиях близких к равновесию. По полученным данным строили 3D-модели профиля рефлекса в программном пакете «Origin Pro».

Фотометрические измерения показали, что ДМЭ-картины от очищенной поверхности монокристалла $(100)Cu-4$ ат. %Mn имеют яркие рефлексы и симметрию, соответствующую структуре (1×1) выбранной грани. Они характеризуются относительно высоким уровнем фона, и анизотропно уширенными дифракционными максимумами.

На рис. 1а,б представлены дифракционные картины от поверхности $(100) Cu-4$ ат. %Mn, зарегистрированные при комнатной температуре и энергии первичного пучка $E_p = 70$ эВ, а также 3D-представление интенсивности зеркального рефлекса. Рис. 1 а соответствует очищенной поверхности, рис. 1 б – поверхности после отжига и охлаждения.

На дифракционных картинах от поверхности отожженного образца при комнатной температуре (рис. 1б) сверхструктурные рефлексы не наблюдаются. Это согласуется с выводами работы [4], в которой формирование поверхностной фазы $c(2 \times 2)$ в процессе напыления Mn на грань $(001)Cu$ начиналось при $\theta_{Mn} > 0,3$ монослоя. С другой стороны, из 3D-моделей рефлексов видно, что, несмотря на отсутствие новой 2D-фазы, атомная структура поверхности кристалла $(100)Cu-4$ ат. %Mn существенно изменяется: в результате отжига и сегрегации Mn падает интенсивность как самого зеркального рефлекса, так и фона под ним. Кроме того он несколько сужается, однако в целом структурное совершенство поверхности, определяемое как отношение ширины пика на полувысоте к его интенсивности, ухудшается (это отношение уменьшается на 30%). Совершенство также можно оценить по степени «вытянутости» среза пика, то есть по отношению малой полуоси эллипса к большой на срезе рефлекса. Сечение профиля рефлекса становится более вытянутым

(приблизительно на 10%), что также подтверждает ухудшение поверхности после отжига.

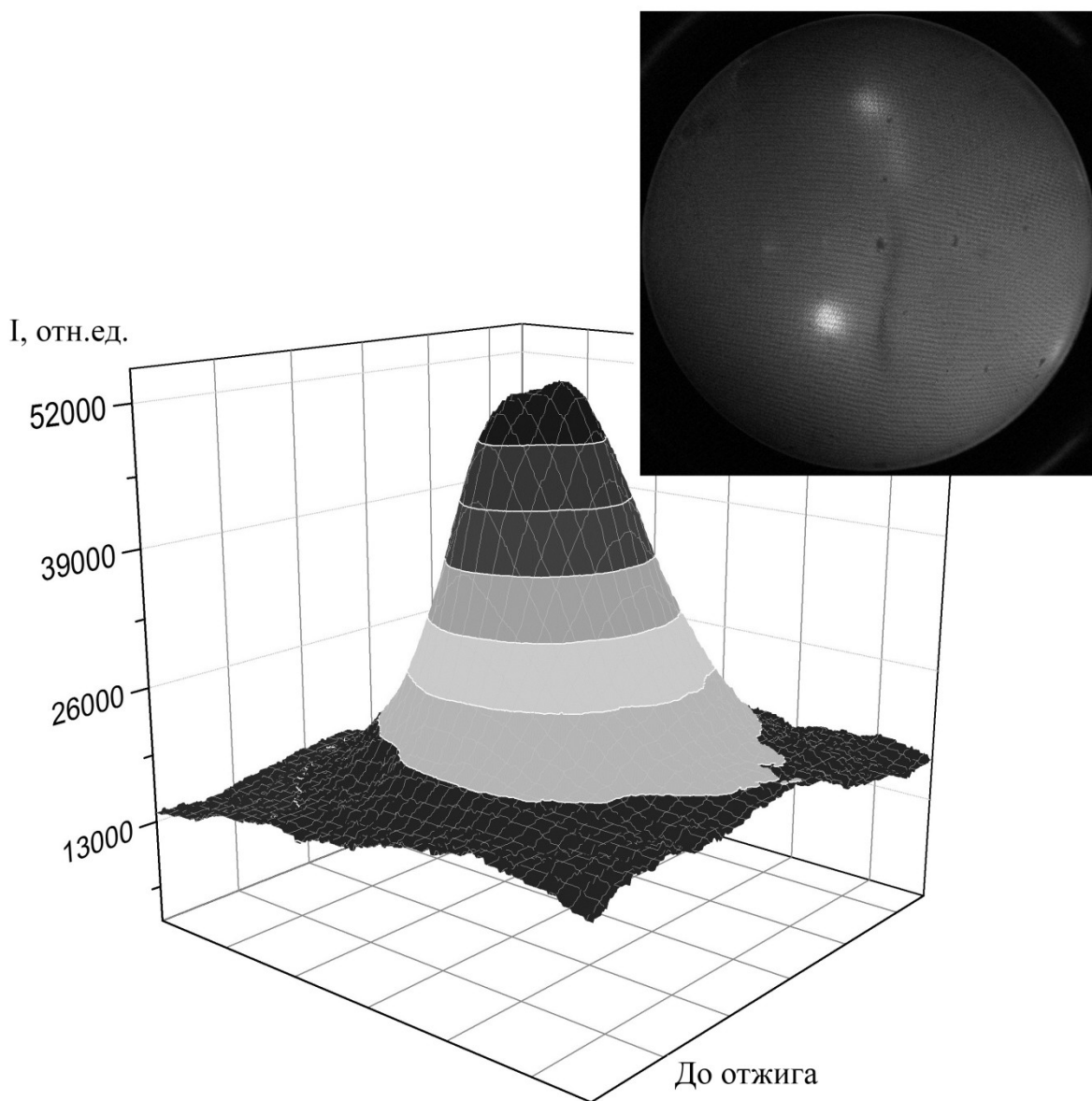


Рис. 1а. ДМЭ-картины и 3D-профили дифракционного рефлекса (00) от поверхности (100) $Cu-4$ ат. % Mn при комнатной температуре и энергии зондирующих электронов $E_p = 70$ эВ для поверхности полученной после ионной очистки

Причиной ухудшения совершенства поверхности предположительно является замещение почти 20% атомов Cu в узлах поверхностной решетки атомами Mn . Факторы, обусловленные увеличением параметра поверхностной элементарной ячейки при добавлении Mn [6] и

уменьшением эффективной массы рассеивающих центров, не столь существенны.

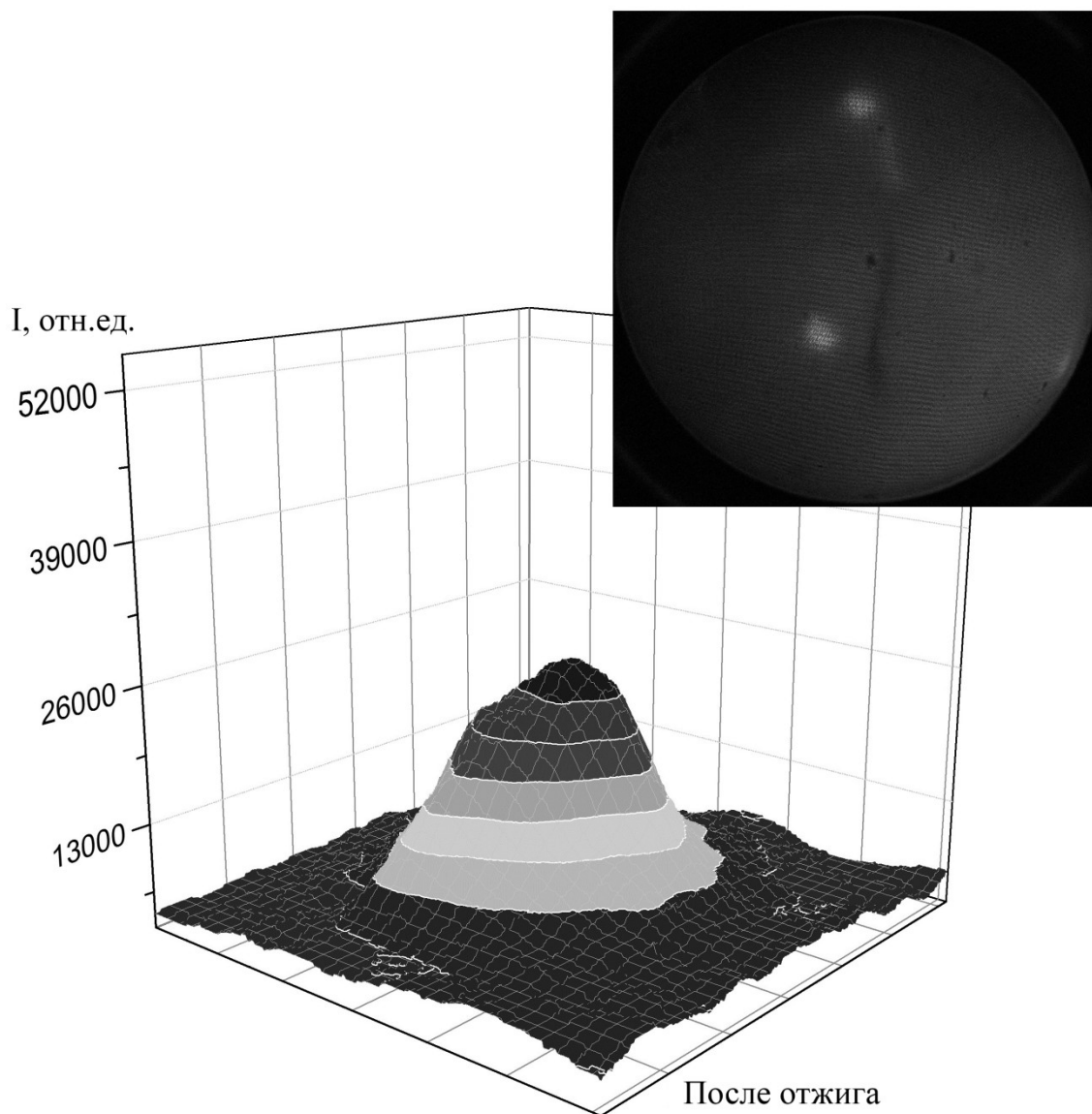


Рис. 1. ДМЭ-картины и 3D-профили дифракционного рефлекса (00) от поверхности (100) $Cu-4 \text{ ат. \%Mn}$ при комнатной температуре и энергии зондирующих электронов $E_p = 70 \text{ эВ}$ для поверхности полученной после отжига и охлаждения

На рис. 2 показаны сечения 3D-профиля зеркального рефлекса (00) плоскостями равной интенсивности, полученные в процессе нагрева распыленной поверхности кристалла. Видно, что контуры, соответствующие одинаковой интенсивности, имеют эллипсовидную форму и вытянуты в направлении [001]. С повышением температуры

отжига контуры заметно сужаются, однако эллипсовидная форма сохраняется.

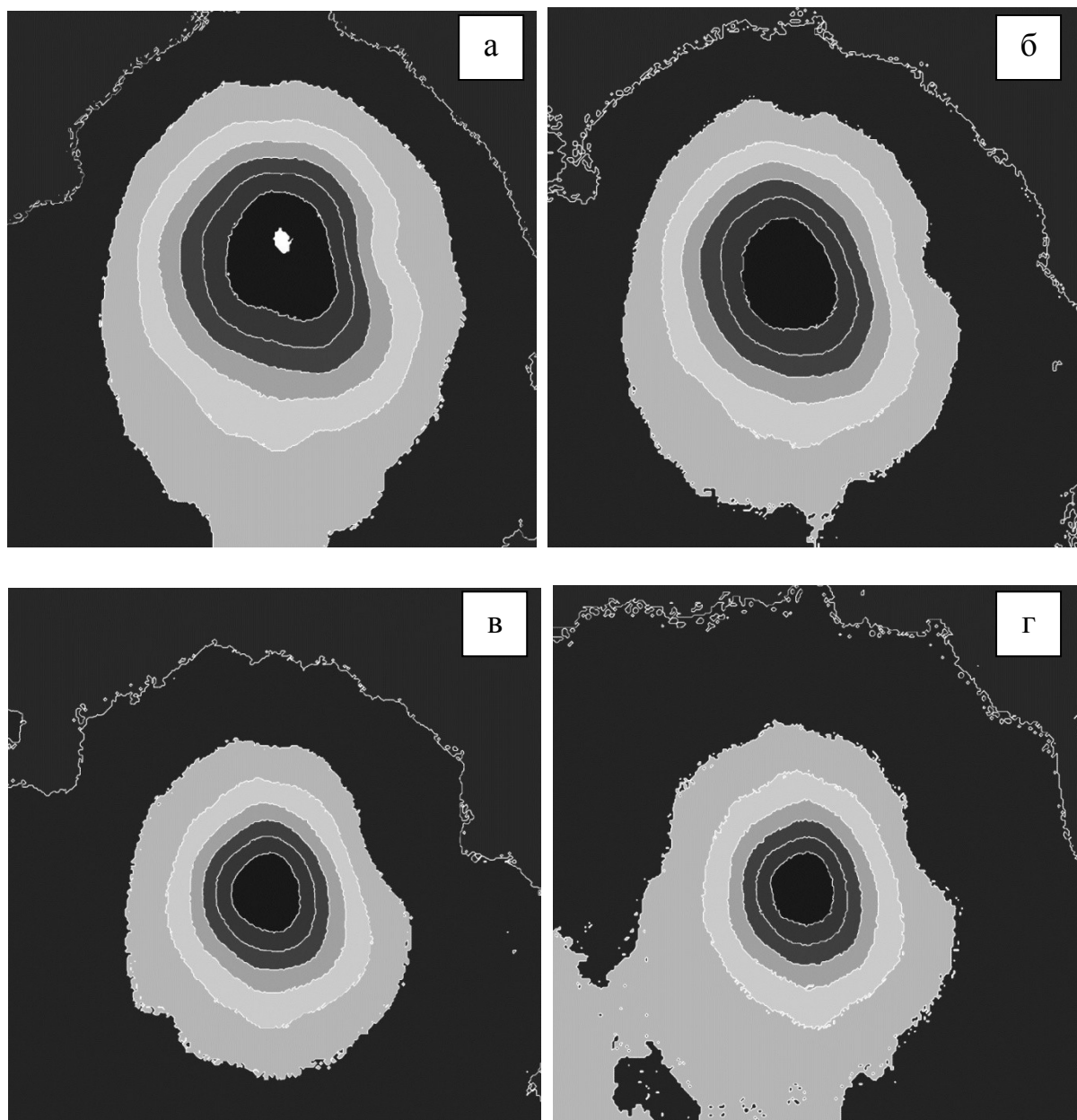


Рис. 2. Сечения 3D-профиля зеркального рефлекса (00) плоскостями равной интенсивности, полученные в процессе нагрева распыленной поверхности кристалла: а – $T = 345K$, б – $T = 515K$, в – $T = 655K$, г – $T = 700K$

Совершенство структуры также оценивалось и для температурной зависимости профиля рефлексов. Результаты показаны на рис. 3. На графике приведены две кривые, по которым можно судить о совершенстве поверхности: отношение интенсивности дифракционного рефлекса к ширине пика на полувысоте (I/b) и отношение полуосей эллипса на срезе

рефлекса (l_1/l_2). Как видно из графика, кривые коррелируют друг с другом и указывают на улучшение состояния поверхности при нагреве до температуры $\sim 700\text{K}$, последующий нагрев вызывает ухудшение структурного совершенства поверхности. Улучшение, предположительно, вызвано термическим «залечиванием» радиационных дефектов, вызванных ионной бомбардировкой, которая проводилась в процессе подготовки поверхности. Но в то же время атомный порядок на поверхности нарушается за счет замещения атомов меди атомами марганца, и при определенной концентрации этот фактор становится доминирующим, что и вызывает последующее ухудшение совершенства поверхности. Следует отметить, что перегиб на кривых I/b и l_1/l_2 (рис. 3) совпадает с перегибом на температурной зависимости концентрации для данного сплава [7].

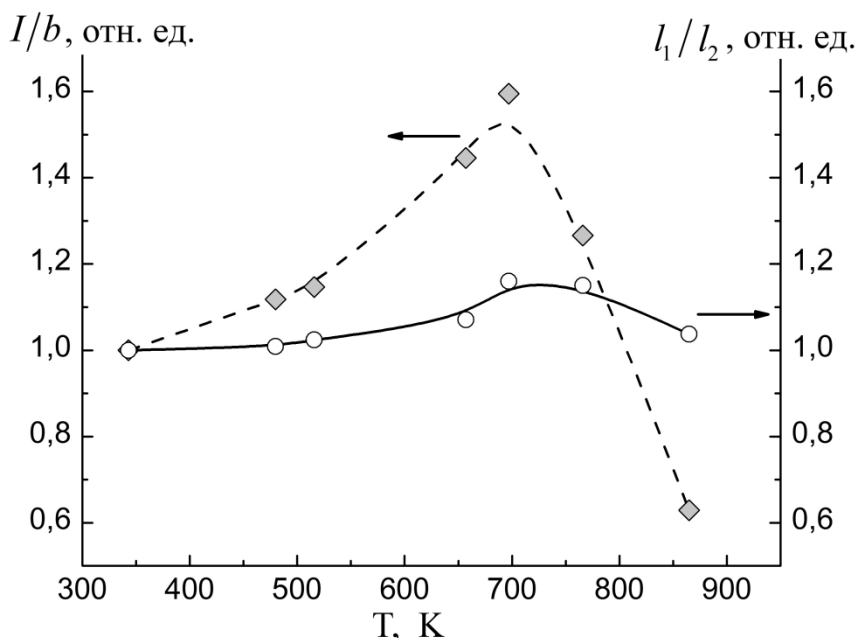


Рис. 3. Структурное совершенство поверхности $(100)\text{Cu}-4 \text{ ат. \%Mn}$ зависимости от температуры отжига, оцененное по отношению интенсивности рефлекса к ширины пика на полувысоте (I/b) и отношению полуосей эллипса на срезе рефлекса (l_1/l_2).

Автор выражает благодарность Сергееву И.Н. за помощь в проведении экспериментальных измерений и за ценные советы.

Библиографический список:

1. Аммер, Х. Характеристика морфологии поверхности с помощью анализа профиля интенсивности рефлексов ДМЭ / Х. Аммер, Х. Тайхерт // Поверхность: Физика. Химия. Механика. – 1987. – № 10. – С. 20-26.
2. Васильев, М.А. Распределение атомных динамических характеристик в поверхностных слоях монокристаллов $\text{Co}_{50}\text{Ni}_{50}$ (110), (100), (111) / М.А. Васильев, А.Г.

Блащук, И.Н. Макеева, О.Р. Грищенко // Металлофизика и новейшие технологии. – 2001 – Т. 23. – № 9. – С. 1185-1201.

3. **Lizzit, S.** The surface phase transition and low-temperature phase of α -*Ga*(010) studied by SPA-LEED / S. Lizzit, A. Baraldi, Ch. Grütter, J.H. Bilgram, Ph. Hofmann // Surface Science. – 2009. – V. 603. – № 21. – P. 3222-3226.

4. **Pan, W.** Stress and structure of $c(2 \times 2)$ and $p2gg(4 \times 2)$ *Mn/Cu*(001) surface alloys / W. Pan, R. Popescu, H.L. Meyerheim, D. Sander, O. Robach, S. Ferrer, Minn-Tsong Lin, J. Kirschner // Physical Review B. – 2005. – V. 71. – № 17. – P. 174439-1-174439-8.

5. **Сергеев, И.Н.** Особенности формирования двумерного сульфида меди при поверхностной сегрегации серы на грани (111)*Cu* (по данным ЭОС, СХПЭЭ и ДМЭ) / И.Н. Сергеев, К.Ч. Бжихатлов, А.А. Шебзухов // VIII Международная конференция «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов»: Труды конференции, Курск (9-10 июня 2011). – Курск: ЮЗГУ, НИТУ «МИСиС», 2011. – С. 543-549.

6. **Осинцев, О.Е.** Медь и медные сплавы. Отечественные и зарубежные марки. Справочник / О.Е. Осинцев, В.Н. Федоров. – М.: Машиностроение, 2004. – 336 с.

7. **Сергеев, И.Н.** Состав и термодинамические характеристики поверхности сплавов *Cu-Mn* / И.Н. Сергеев, К.Ч. Бжихатлов, А.А. Шебзухов // Пятнадцатый международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-15): Труды симпозиума. Т. 2, Ростов-на-Дону – пос. Лоо (13-18 сентября 2012). – Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012. – С. 357-360.