

# ПРОЯВЛЕНИЕ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ СУБМОНОСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ В ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФфуЗИИ БАРИЯ НА ГРАНИ (001) МОЛИБДЕНА

Ю.С.Ведула, А.Т.Лобурец, А.Г.Наумовец

При исследовании поверхностной диффузии бария на грани (011) молибдена обнаружены особенности на диффузионных распределениях, коррелирующие со структурными переходами в субмонослойной пленке бария.

Субмонослойные адсорбированные пленки, представляющие собой квазидвумерные системы, в общем случае имеют довольно сложные фазовые диаграммы. Изменения структуры пленки при увеличении концентрации адсорбированных атомов (адатомов) коррелируют с изменениями электронных свойств поверхности и кинетических характеристик адсорбции [1]. Здесь мы сообщаем о результатах опытов, демонстрирующих влияние фазового состояния пленки на процесс поверхностной диффузии.

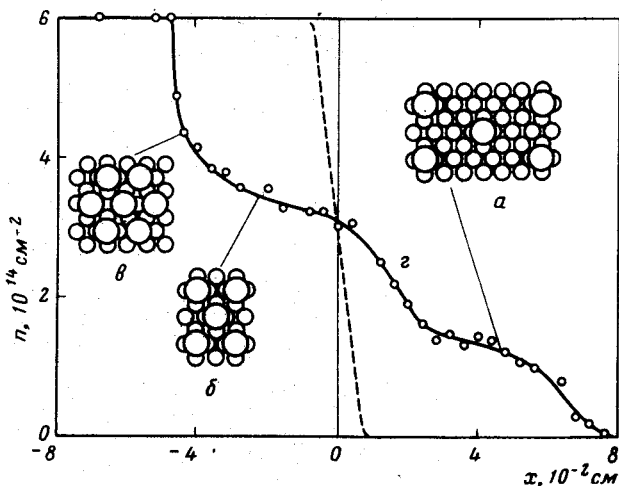


Рис. 1. *a* — *в* — модели поверхностных структур согласно [2]: *a* — с (6 × 2); *б* — с (2 × 2), *в* — гексагональная структура. Малые кружки — атомы Мо, большие — атомы Ва. *г* — Распределение атомов Ва вдоль подложки  $n(x)$  после прогрева при  $T = 450\text{K}$  в течение 12 мин. Начальное распределение указано пунктиром

Исследовалась поверхностная диффузия Ва на грани (011) Мо. Как показано в [2], при небольших степенях покрытия атомы Ва образуют двумерные решетки, согласованные со структурой подложки (рис. 1, *a*, *б*).

При концентрациях адатомов  $n > 3,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  структурная согласованность пленки с подложкой нарушается — адатомы образуют двумерную гексагональную решетку (рис. 1, *в*), период которой плавно уменьшается, пока при  $n = 6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  не образуется плотный монослой.

При помощи подвижной электронной пушки, формирующей пучок диаметром  $\approx 20 \text{ мкм}$ , измерялось распределение работы выхода  $\phi$  вдоль поверхности, а затем по известной зависимости  $\phi(n)$  находилось распределение адсорбата на подложке  $n(x)$  [3].

При диффузии Ва из начального монослойного покрытия, заданного в виде "ступеньки", на кривой  $n(x)$  обнаруживаются два участка, в пределах которых градиент  $|dn/dx|$  относительно мал: при малых концентрациях ( $n \approx 1,3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ) и при  $n \approx 3,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  (рис. 1, *г*). Отсюда следует [4], что в указанных областях покрытий, первая из которых соответствует решетке типа  $c(6 \times 2)$  (рис. 1, *а*), а вторая —  $c(2 \times 2)$  (рис. 1, *б*), коэффициент диффузии  $D$  имеет повышенную величину. (При температурах, превышающих температуры перехода порядок — беспорядок для этих структур, в пленке, по-видимому, сохраняется характерный для них ближний порядок [2]).

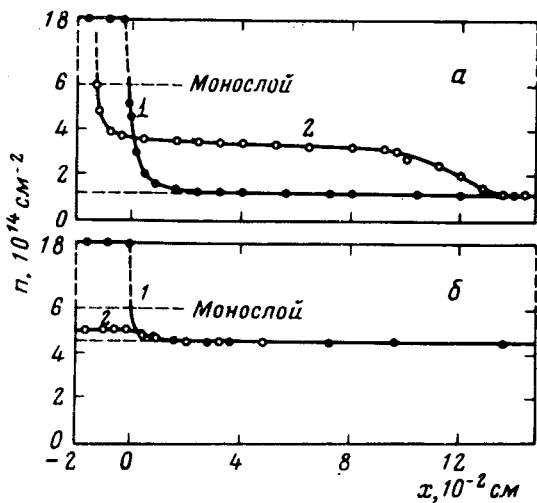


Рис. 2. Зависимости  $n(x)$  до прогрева (1) и после прогрева (2) многослойных пленок. *а* —  $n_{II} = 1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ,  $T = 500\text{К}$ ,  $t = 15 \text{ мин}$ . *б* —  $n_{II} = 4,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ,  $T = 550\text{К}$ ,  $t = 55 \text{ мин}$ . Начальные покрытия в "ступеньках" — три монослоя. Концентрации в "пъедестале" отмечены горизонтальными пунктирными линиями

При сверхмонослойном начальном покрытии не удастся наблюдать диффузию Ва по механизму "разворачивающегося ковра" [5]. (В этом случае на переднем крае диффузионного распределения должен формироваться плотный монослой, служащий подложкой для диффузии атомов во втором слое). Этот вывод иллюстрируют результаты, представленные на рис. 2. При получении этих данных на поверхность напылялся сначала сплошной слой Ва ("пъедестал") при той или иной концентрации  $n_{II}$ ; затем на часть поверхности дополнительно напылялось сверхмонослойное покрытие с резкой границей ("ступенька"). В условиях, когда  $n_{II} < 3,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , на диффузионных распределениях всегда получается плато, соответствующее  $n = 3,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , т. е. фазе  $c(2 \times 2)$  (рис. 2, *а*). Напомним, что фаза  $c(2 \times 2)$  имеет почти вдвое меньшую плотность, чем полный монослой, и представляет собой двумерный конденсат: ес-

ли увеличивать концентрацию адатомов Ва на грани (011) Мо путем напыления из газовой фазы, то после достижения некоторого критического покрытия ( $n \approx 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  при 77К) наблюдается фазовый переход первого рода типа двумерной конденсации от этого покрытия к фазе с ( $2 \times 2$ ).

Когда  $n_{\text{II}} > 3,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , что соответствует образованию гексагональной структуры, диффузия существенно замедляется, причем покрытия справа от "ступеньки" также всегда являются субмонослойными, а концентрация спадает с расстоянием плавно. В известном смысле критическим оказывается покрытие "пьедестала"  $n_{\text{II}} \approx 4,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  (рис. 2, б). Ему соответствует гексагональная решетка, период которой в направлении  $[0\bar{1}1]$  совпадает с периодом решетки грани (011) Мо (рис. 1, в). При этой и больших  $n_{\text{II}}$  (включая и плотное монослойное покрытие) вообще не удается зарегистрировать диффузию использованным методом. Этот результат можно объяснить следующим образом. При  $n > 4,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$   $D$  в первом монослое резко уменьшается, о чем свидетельствует большое значение градиента  $|dn/dx|$  в этой области покрытий (рис. 1, в). С другой стороны, не происходит заметного смещения диффузионной границы и за счет диффузии во втором слое. Возможно, что отрыв атомов Ва от полислоного покрытия (двумерная сублимация) требует столь значительной энергии активации, что при соответствующей температуре оторвавшиеся атомы очень скоро десорбируются из второго слоя в вакуум. При этом они не могут продиффундировать на расстояние, которое можно было бы заметить в пределах разрешающей способности метода. Попытки ускорить диффузию за счет повышения температуры приводят лишь к быстрому испарению "ступеньки" (рис. 2, б).

Приведенные результаты показывают, что в процессе поверхностной диффузии находят четкое проявление изменения фазового состояния субмонослойной пленки, происходящие при увеличении концентрации адатомов. Отметим, что в работах [2, 3, 6] на диффузионных распределениях также наблюдались некоторые особенности при субмонослойных покрытиях, однако о структуре изученных в них пленок не было прямых сведений.

Авторы благодарны В.К.Медведеву и А.Г.Федорусу за полезные дискуссии.

Институт физики  
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию  
27 июня 1978 г.

### Литература

- [1] Л.А.Большов, А.П.Напартович, А.Г.Наумовец, А.Г.Федорус. УФН, 122, 125, 1977.  
[2] A. G. Fedorus, A. G. Naumovets, Yu. S. Vedula. Phys. Stat. Sol. (a), 13, 445, 1972.

- [ 3] Ю.С.Ведула, А.Г.Наумовец. Сб. Поверхностная диффузия и растекание, М., изд. Наука, 1969, стр. 149.
- [ 4] С.Д.Герцрикен, И.Я.Дехтяр. Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе, М., Физматгиз, 1960.
- [ 5] И.Л.Сокольская. Сб. Поверхностная диффузия и растекание, М., изд. Наука, 1969, стр. 108.
- [ 6] R. Butz. H. Wagner. Proc. 7-th Intern. Vacuum Congress and 3-rd Intern. Conf. on Solid Surfaces, Vienna, 1977, p. 1289.
-