



# Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005" International Conference "Fizika-2005" Международная Конференция "Fizika-2005"

7 - 9  
Iyun  
June 2005  
Июнь

səhifə  
№46  
page 183-185  
стр.

Bakı, Azərbaycan

Baku, Azerbaijan

Баку, Азербайджан

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ РАСТВОРЕНИЯ И ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ АТОМОВ In, Sm и Ba ДЛЯ ИРИДИЯ.

ОРУДЖОВ А.К., ДАШДЕМИРОВ А.О., АХМЕДОВ А.Т., ЕЛЧИЕВА А.К.

*Бакинский Государственный Университет ,  
г.Баку ул.З.Халилова 23  
[E-mail.orar@mail.ru](mailto:E-mail.orar@mail.ru).*

В данной работе производилось определение энергии активации растворения атомов бария, самария и индия в иридий и их энергия активации выделения из иридия. Показано, что с увеличением атомного радиуса как энергия активации растворения атомов в иридий, так и их энергия выделения из иридия увеличивается. Установлено, что в межфазовой границе поверхность-объем металла для диффузии атомов имеется антисимметричный потенциальный барьер.

В [1] было обнаружено новое явление-суперэффективная диффузия (СЭД) атомов калия, а в [2] СЭД атомов цезия в нагретую гран (111) иридия с монослоем графита при адсорбции атомов К и Cs на ее поверхности. Это явление было объяснено интеркалрированием, т.е.самопроизвольным проникновением атомов калия и цезия под монослой графита на иридий и из интеркалрированного состояния их диффузией в иридий. В[2] была рассмотрена кинетика растворения и выделения атомов через межфазовую границу поверхность-объем металла и получены формулы для определения энергии активации диффузии атомов в металл и из металла. Как известно [3] монослой графита интеркалрируют многие атомы: К, Cs, Ва, Sr, Pt, С,а диффузия атомов в металл является чрезвычайно важным, т.к. она может служить для создания новых материалов. По этому определение энергии активации диффузии атомов через межфазовую грани поверхность- объем металла является актуальной задачей.Целью данной работы является определение энергии растворения и выделения атомов индия, самария и бария для иридия.

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА.

Эксперименты проводились в высоко вакуумной магнитной масс-спектрометрической (М-С) установке, подробное описание которого содержится в [4]. Иридиевая лента с размерами 50мм x 1,5 мм x

0,03 мм помещалась в фокусе М-С перед входной щелью. Поток атомов на поверхность иридиевой ленты поступал из испарителя, при необходимости которого его можно было перекрыть заслонкой, управляемый из вне прибора магнитом. Ток термоэлектронной эмиссии ТЭ измеряли на коллекторе с антидинаatronной сеткой, а ток поверхностной ионизации ПИ атомов на выходе М-С с помощью вторичного ионно-электронного умножителя. Поток нейтральных атомов десорбируемых с ленты, при необходимости ионизировали электронным ударом в камере ионизации. Монослой графита на грани (111) иридия при  $T > 1300\text{K}$  получили путем напуска бензола в источник М-С из системы напуска .При образовании монослоя графита на грани(111) иридия его работа выхода уменьшалась от 5,8 эВ до 4,5 эВ и кроме того образование монослоя графита на иридии так же определили по диссоциации молекул CsCl, коэффициент диссоциации которого уменьшался от  $\gamma = 1$  для грани (111)Ir до  $\gamma = 10^{-3} \div 10^{-5}$  для грани(111) Ir с монослоем графита (Ir-C) [ 4-5].Температуру иридиевой ленты измеряли оптическим пирометром через пирометрическое окно а в не пирометрической области ее находили из зависимости температуры от тока накала путем экстраполяции этой зависимости к комнатной температуре. Потоки атомов индия и самария находили из сравнения с потоком атомов бария, определяемый следующим образом. Известно,

что в зависимости работы выхода металла от степени покрытия атомов бария имеется минимум, который соответствует оптимальной степени покрытия [6]. Этот минимум в зависимости  $\varphi$  от  $\theta$  имеющегося и для Ir(111)-Ba нами был использован для определения  $\nu_{Ba}$ . Для этого в области температур, где нет десорбции атомов бария определили время образования оптимального покрытия  $t_{opt}$ . Затем, зная  $N_{opt}=3,9 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  атомов бария на металлах [5,6] находили поток атомов бария

$$\nu_{Ba} = \frac{N_{opt}}{t_{opt}} \quad (1)$$

Потоки атомов индия и бария были найдены из сравнения токов ПИ их атомов с током ПИ атомов бария с известной плотностью. Ток ПИ атомов определяется формулой [8]

$$I^+ = e \nu s \beta \quad (2)$$

где  $\nu$  - плотность потока атомов падающих на поверхность металла,  $s$  - площадь поверхности с которой отбирается ток ионов,  $\beta$  - коэффициент ПИ, которой определяется формулой [8]

$$\beta = \frac{1}{1 + \frac{Q_0}{Q_+} \exp\left[\frac{e(V - \varphi)}{kT}\right]} \quad (3)$$

где  $Q_0/Q_+$  - отношение статистических сумм атомного и ионного состояния,  $e\varphi$  - работа выхода,  $eV$  - энергия ионизации атома. Тогда потоки атомов индия и самария из (2) определяется формулой

$$\nu = \frac{I^+}{I_{Ba}^+} \cdot \frac{\beta_{Ba}}{\beta} \cdot \nu_{Ba} \quad (4)$$

Давление остаточных газов в приборе было  $\sim 5 \cdot 10^{-10}$  тор.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ.

Нагретый до  $T < 1700 \text{ K}$  Ir-C облучали потоком атомов с плотностью от  $1 \cdot 10^{11}$  до  $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$  за определенные интервалы времени. После выдержки Ir-C в потоке атомов записывался спектр термодесорбции (ТДС) ионов (метод вспышки – ионный вариант). Из ТДС ионов  $\text{In}^+$ ,  $\text{Sm}^+$  и  $\text{Ba}^+$  следовало, что наблюдается пик как интеркалированных, так и диффундирующих атомов из иридия. При длительной выдержке нагретый до  $T < 1700 \text{ K}$  Ir-C в потоке атомов с плотностью  $\nu = 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$  происходило растворение атомов в иридий, действительно, после этого при высоких

температурах  $T > 1900 \text{ K}$  наблюдалась диффузия растворенных атомов из иридия, и с увеличением  $T$  их поток увеличивается. Это явление ранее [2] было использовано для описания кинетики и определения энергии активации выделения атомов из металла. В другой группе опытов из анализа ТДС следовало, что после экспозиции Ir-C потоком атомов определенное время  $t$ , с течением времени, из-за диффузии атомов в иридий, количество интеркалированных атомов уменьшается. Это ранее [2] было использовано для описания кинетики растворения атомов в металл и определения их энергии активации.

### 1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ РАСТВОРЕНИЯ АТОМОВ ИНДИЯ, БАРИЯ И САМАРИЯ.

В [2] была рассмотрена кинетика растворения атомов в металл и было получено выражение для энергии растворения ( $E_{n1}$ ) атомов в металл

$$E_{n1} = kT \ln \left[ \frac{t}{\tau_0 \ln(N_0/N)} \right] \quad (5)$$

где  $T$  - температура металла,  $N_0$  - количество атомов под монослоем графита на металле в момент времени  $t=0$ ,  $N$  - то же самое через время  $t$  в течение которого из-за диффузии количество атомов под монослоем графита

$N_0 - N$ ,  $\tau_0 \approx 10^{-13} \text{ с}$ . – постоянное. Для определения  $E_{n1}$  по формуле (5) отношение  $N_0/N$  определялось из сравнения площадей пиков, ТДС ионов следующим образом. После выдержки нагретой до температуры  $T < 1700 \text{ K}$  Ir-C в потоке атомов за определенное время  $t_1$ , сразу записывался ТДС ионов, площадь пика, которая соответствовала  $N_0$ . Затем снова на Ir(111) был получен монослой графита и, в прежнем режиме, Ir-C выдерживалось в потоке атомов, а после этого через время  $t$  снова записывался ТДС ионов, площадь пика которого соответствовала  $N$ . Тогда отношение  $N_0/N$  определялось как отношение площадей пиков соответствующих ТДС. Из многих определений для  $E_{n1}$  атомов индия, бария и самария в иридий были получены значения:  $E_{n1}(\text{In}) = 5,05 \pm 0,05 \text{ эВ}$ ,  $E_{n1}(\text{Sm}) = 5,50 \pm 0,05 \text{ эВ}$  и  $E_{n1}(\text{Ba}) = 6,05 \pm 0,05 \text{ эВ}$ .

### 2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ АТОМОВ ИНДИЯ, БАРИЯ И САМАРИЯ.

В [2] так же была рассмотрена кинетика выделения предварительно растворенных атомов из металла и получена формула для определения тока их ПИ

$$I^+ = \frac{CeS \exp(-\frac{E_{n1}}{kT})}{1 + \frac{Q_0}{Q_+} \exp[\frac{e(V - \Phi)}{kT}]} \quad (6)$$

где  $S$ -постоянная,  $E_{n1}$ -энергия активации выделения атомов из металла, а остальные величины в (6) указаны в тексте. Из формулы (6) по двум значениям  $I^+$ , измеренным при двух значениях  $T$ , металла можно найти  $E_{n1}$ .

Для ПИ атомов индия на Ir(111)  $\Phi_{Ir(111)} \approx V_{In} = 5,785B$  и поэтому из (6)

$$I^+ = C_1 \exp(-\frac{E_{1n}}{kT}) \quad (7)$$

где  $C_1 = \frac{CeS}{1 + Q_0/Q_+} = const.$

Действительно, зависимость  $\ln I_{In}^+ = f(1/T)$  была линейная и по тангенсу угла этой зависимости найдено значение  $E_{1n}(In) = 5,40 \pm 0,10$  эВ. Случае диффузии атомов бария из иридия ( $\Phi_{Ir(111)} = 5,80B, V_{Ba} = 5,21B$ ), в знаменателе формулы (6) экспонентой можно пренебречь. Тогда

зависимость  $\ln I_{Ba}^+ = f(1/T)$  является так же линейным. Из опыта полученная зависимость  $\ln I_{Ba}^+ = f(1/T)$  была линейная и из наклона находили  $E_{1n} = 7,10 \pm 0,10$  эВ. При диффузии атомов самария ( $V = 5,70B$ ) из иридия по формуле (6) было получено  $E_{1n}(Sm) = 6,30 \pm 0,10$  эВ. На основании полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1. Существенная разница в энергиях активации растворения и выделения атомов In, Sm и Ba для иридия показывает, что в межфазовой границе поверхность-объем металла для диффузии имеется несимметричный потенциальный барьер, а большое значение энергии растворения  $E_{n1} \sim (5 \div 6)$  эВ этих атомов в иридий указывает на то, что диффузия в основном идет по вакансиям для образования которых требуется большая энергия.
2. Увеличение как энергии растворения в последовательности атомов In, Sm, Ba так и их энергии активации выделения для иридия можно объяснить увеличением их атомных радиусов:

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ 1,62 \text{ \AA} & (In); & 1,85 \text{ \AA} & (Sm); & 2,17 \text{ \AA} & (Ba). \end{array}$$

- 
- [1]. А.Я. Тонтегоде, Ф.К.Юсифов. Высокоэффективная диффузия в иридий атомов К, адсорбирующихся на монослое графита на иридий. ФТТ, 1993, т.35 №4, с.987-993.
- [2]. А.Я. Тонтегоде, Ф.К.Юсифов. Интенсивная диффузия атомов Cs в иридий, стимулированная монослоем графита на его поверхности. Поверхность, 1994, №4, с.20-24.
- [3]. А.Я. Тонтегоде, Е.В.Рутков. Интеркалирование атомами двумерной графитовой пленки на металлах. УФН, 1993, т.163, №11, с.57-74.
- [4]. А.К.Оруджов. Изучение начальной стадии образования углеродной пленки на иридий. Вестник БГУ 1998 №2 с.86-92.
- [5]. Э.Я.Зандберг, А.Я.Тонтегоде, Ф.К.Юсифов. Поверхностная ионизация молекул CsCl на пленочном эмиттере Ir(111)-С.ЖТФ, 1972, т.42, №1, с.171-175.
- [6]. В.К.Медведев., Т.Р.Смерка. Адсорбция бария и кислорода на грани (112) вольфрама. ФТТ., 1973, т.15, N3, с.724-731.
- [7]. Х.И.Лах, З.В.Стасюк. Адсорбция бария и кислорода на поверхности (1010) рения. ЖТФ, 1982, т.52, N7, с.1397-1400.
- [8]. Э.Я.Зандберг, Н.И.Ионов. Поверхностная ионизация. М, Наука, 1969, с.432.