

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением геометрически неоднородных поверхностей

© Д.Ю. Усачёв*, А.М. Шикин*, А.Ю. Варыхалов*,**, В.К. Адамчук*, О. Rader**

* Научно-исследовательский институт физики им. В.А. Фока Санкт-Петербургского государственного университета, 198504 Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

** BESSY,

D-12489 Berlin, Germany

E-mail: usatchevd@bk.ru

(Поступила в Редакцию 5 сентября 2006 г.)

Рассмотрен процесс формирования фотоэлектронных спектров с угловым разрешением при исследовании кристаллических поверхностей со сложным геометрическим рельефом. Предложена простая модель тонкой гофрированной монокристаллической пленки, иллюстрирующая основные закономерности этого процесса. Показано, что в фотоэлектронных спектрах таких поверхностей проявляются особенности, не отражающие истинную электронную структуру системы, а являющиеся результатом ее суперпозиции с геометрической структурой. Для демонстрации результатов использования модели была сформирована физическая система на основе ступенчатых поверхностей Ni(771) и Ni(755) с периодическими ступеньками. Показано, что при формировании монослойного графитового покрытия эти поверхности фасетируются, формируя геометрически неоднородный рельеф поверхности. Фотоэлектронные спектры, полученные от такой поверхности, позволяют дать количественную характеристику как электронной структуры поверхности, так и ее геометрических свойств. Для независимого определения топографии поверхности системы использовалась сканирующая туннельная микроскопия.

Работа выполнена в рамках проектов НШ-9826.2006.2 (2006-РИ-112.0/001/136) и РФФИ-ННИО (06-02-04008) и поддержана ФЦНТП Роснауки (РИ-27/016, РИ-16.0/025/021 (02.438.11.7051) и ИН-12.1/008).

PACS: 79.60.-i, 79.60.Dp, 64.70.Nd

1. Введение

Одной из важнейших проблем физики поверхности является определение электронной энергетической структуры поверхности твердого тела, поскольку без описания электронной структуры невозможно глубокое понимание физических явлений и процессов, происходящих на поверхности. Основным и наиболее информативным методом исследования электронной энергетической структуры поверхности является фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ФЭСУР), дающая информацию о дисперсии электронных состояний в валентной зоне на поверхности твердого тела. С большим успехом эта методика применяется для исследования плоских (геометрически однородных) монокристаллических поверхностей, но, как только появляется необходимость изучения поверхностей с более сложным геометрическим рельефом или геометрически неоднородных поверхностей, возникают существенные проблемы. Дело в том, что корректное определение электронной структуры поверхности по результатам фотэмиссионных измерений возможно лишь в том случае, если известно направление нормали к поверхности. Для плоской поверхности нормаль всегда единственна, но геометрически неоднородная поверхность может состоять из участков, имеющих различные направления нормали. Поэтому определение электронной энергетической структуры такой поверхности с помощью ФЭСУР становится невозможным без привлечения

дополнительных методик исследования. В связи с этим важной задачей является определение основных закономерностей формирования фотоэлектронных спектров геометрически неоднородных поверхностей, в чем и заключается основная цель настоящей работы.

Особо остро проблема интерпретации фотоэлектронных спектров встает при анализе особенностей электронной структуры латеральных поверхностных сверхрешеток из упорядоченно расположенных наноэлементов (квантовых проволок, полосок, квантовых точек), сформированных на ступенчатых поверхностях монокристаллов с периодически расположенными ступеньками [1]. Наличие в таких сверхструктурах дополнительной периодичности, характеризующейся соответствующим вектором латеральной трансляции, приводит к значительной модификации электронной структуры, а следовательно, и свойств всей системы. В электронной структуре таких систем вследствие сверхпериодичности возможно появление (дублирование) дисперсионных ветвей электронных состояний, сдвинутых на величину обратного вектора латеральной трансляции, появление энергетических щелей в месте пересечения ветвей, модуляция электронной плотности вдоль ветви, обусловленная размерным квантованием в пределах одного периода латеральной трансляции и т.п. [2,3].

Для структур, создаваемых на ступенчатых поверхностях, могут иметь место эффекты структурной перестройки под действием внешних факторов (температура, взаимодействие с адсорбатом и т.д.), которые могут

сопровождаться изменением профиля поверхности и нарушать ее первоначальную латеральную периодичность. Одной из таких структурных перестроек является так называемое фасетирование поверхности [4], т.е. выход на поверхность других кристаллографических граней со структурой, отличной от структуры исходной поверхности. При этом формируются так называемые фасетки, т.е. профиль поверхности вместо упорядоченного ступенчатого становится гофрированным, поверхность становится геометрически неоднородной. Естественно, что экспериментально полученные фотоэлектронные спектры такой системы будут существенно отличаться от спектров исходной латерально-периодической поверхности и нести совершенно другую информацию. Поэтому одной из проблем электронной спектроскопии (в частности, фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС)) является корректное разделение эффектов фасетирования поверхности системы и эффектов латеральной периодичности.

В настоящей работе для иллюстрации основных особенностей фотоэлектронных спектров, характерных для геометрически неоднородной поверхности, используются эффекты фасетирования ступенчатых поверхностей Ni (771) и Ni (755) при формировании на них монослойного графитового покрытия. Необходимость анализа этих систем вызвана, с одной стороны, результатами работы [3], где в фотоэлектронных спектрах ступенчатой поверхности Ni (771) наблюдались эффекты латеральной периодичности для графитовых полосок, сформированных на этой поверхности, а с другой — результатами работы [5], где была показана возможность фасетирования для ступенчатой поверхности Ni (755), покрытой монослоем графита или другим адсорбатом. Одновременно в работе [6] было показано, что при попытке создания графитовых полосок на ступенчатой поверхности 6H-SiC в фотоэлектронных спектрах наблюдаются особенности, которые можно объяснить формированием фасеток на поверхности системы, но не было дано детального описания связи этих особенностей с формирующимся фасетированным рельефом поверхности.

2. Модель

Простейшим случаем геометрически неоднородной поверхности является поверхность, сформированная двумя различными кристаллографическими плоскостями, расположенными под некоторым углом друг к другу. Будем считать, что на такой поверхности формируется слой адсорбата, электронная структура которого изучается с помощью ФЭСУР, и проанализируем возможные особенности фотоэлектронных спектров, которые могут наблюдаться при исследовании такой системы. Будем исходить из простейших предположений.

а) Электронная структура адсорбата является двумерной, что соответствует монослою адсорбата и исключает зависимость поведения рассчитанных ветвей в фотоэлектронных спектрах от энергии фотонов.

б) Кристаллическая структура адсорбата на различных гранях подложки одинакова; следовательно, не отличается и электронная структура валентной зоны, т.е. соответствующие дисперсионные зависимости одинаковы для каждой из граней.

с) Дисперсионные зависимости адсорбата $E(k)$ характеризуются простейшей параболической зависимостью $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_e^* - V_0$, где E — энергия связи, k — квазиимпульс, m_e^* — эффективная масса электрона, V_0 — „внутренний потенциал“.

Прежде чем исследовать геометрически неоднородную поверхность, рассмотрим плоскую, или геометрически однородную, поверхность. На рис. 1 представлены модельные дисперсионные зависимости и распределение фотоэлектронов, предполагаемые для плоской системы, т.е. для тонкой плоской пленки адсорбата. Здесь (рис. 1, б) схематично показано распределение фотоэлектронов в полярных координатах, причем по вертикали отложена величина кинетической энергии (с точностью до произвольной постоянной), а в радиальном направлении — величина полярного угла θ . Это распределение имеет простой вид

$$E_{\text{kin}}(\theta, \varphi) = \frac{h\nu - V_0 - W}{1 - \frac{m_e}{m_e^*} \sin^2 \theta}, \quad (1)$$

где E_{kin} — кинетическая энергия вылетающих фотоэлектронов, W — работа выхода, $h\nu$ — энергия фотонов, m_e — масса электрона. На рис. 1, с показано сечение этого распределения при фиксированном азимутальном угле φ и изменении полярного угла θ (отрицательные значения θ соответствуют углу $\varphi + \pi$), которое обычно и измеряется в реальном эксперименте. Видно, что его форма явным образом зависит от энергии фотонов. Соответствующая зависимость для другой энергии фотонов показана на рисунке штриховой линией. Дисперсионные зависимости $E(k_{\parallel})$ могут быть восстановлены (что и делается обычно при анализе угловых зависимостей фотоэлектронных спектров) из распределения с помощью хорошо известных соотношений

$$k_{\parallel} = \frac{\sqrt{2m_e E_{\text{kin}}}}{\hbar} \sin \theta, \quad E = E_{\text{kin}} - h\nu + W, \quad (2)$$

где k_{\parallel} — составляющая волнового вектора, параллельная поверхности, θ — полярный угол относительно нормали к поверхности. Как показано на рис. 1, д, результат такой процедуры уже не зависит от энергии фотонов и отражает реальные дисперсионные характеристики электронной структуры.

Для построения модели простейшей геометрически неоднородной поверхности рассмотрим „гармошку“ из тонкой адсорбированной пленки, характеризующуюся постоянным углом γ между нормальными к двум составляющим плоскостям (рис. 2, а), что является некоторым приближением к фасетированной поверхности. Какие серии фотоэлектронных спектров следует ожидать при

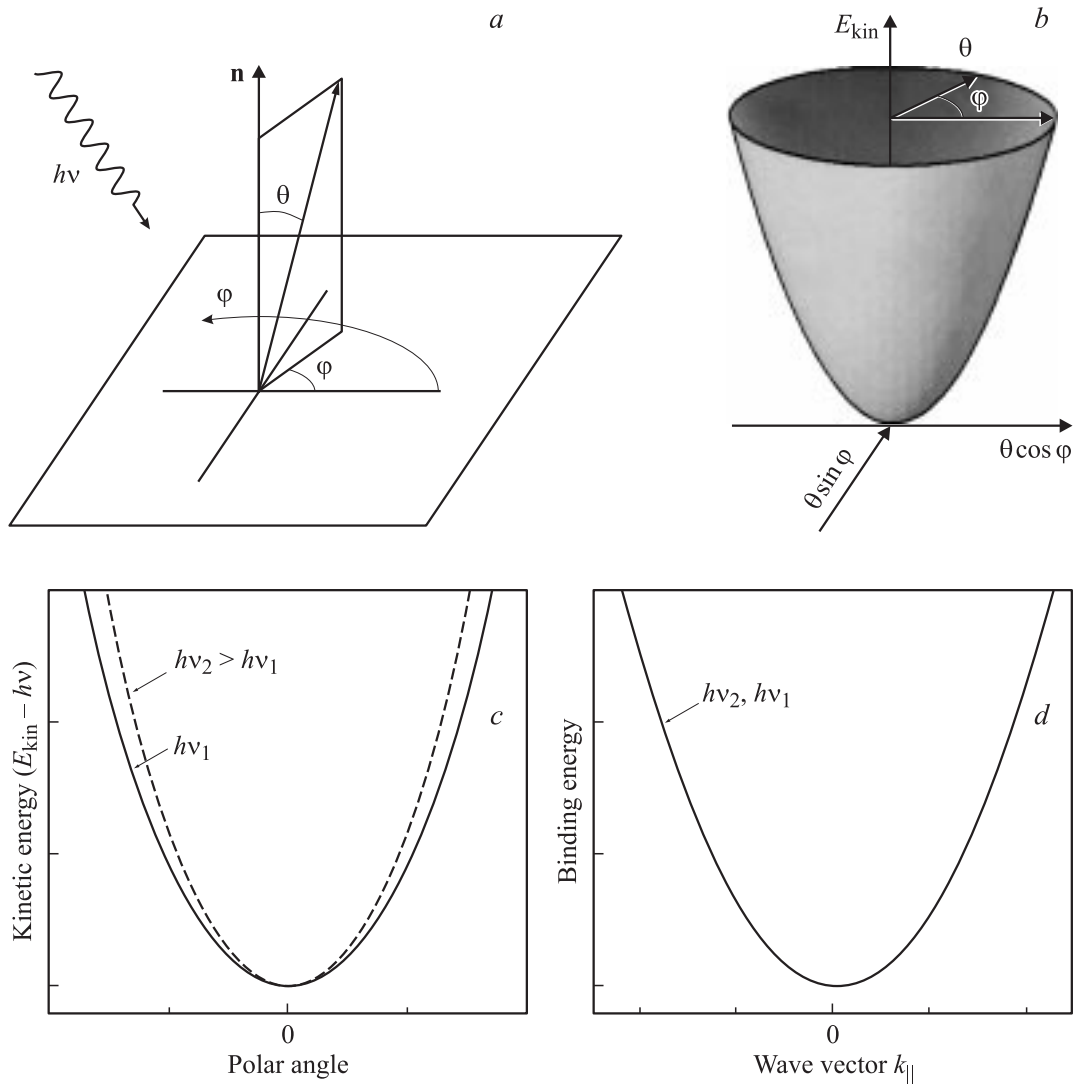


Рис. 1. Схема формирования фотоэлектронных спектров для тонкой плоской монокристаллической пленки. *a* — модель тонкой пленки и пространственная система координат, выбираемая при измерении фотоэлектронных спектров; *b* — изображение модельного распределения фотоэлектронов пленки в соответствии с формулой (1); *c* — сечение распределения фотоэлектронов в одном из направлений, измеряемое в эксперименте; *d* — зонная структура, рассчитанная с помощью соотношений (2).

измерениях вдоль и поперек сформированных террас? Ответ на этот вопрос будет зависеть от того, какое направление выберет экспериментатор в качестве нормали к формируемым микроповерхностям „гармошки“. Выберем в качестве таковой нормаль к микроповерхности $n = n_1$ (рис. 2, *a*). На рис. 2, *b* схематично показано в разрезе распределение фотоэлектронов от рассматриваемой поверхности. Оно состоит из двух частей, соответствующих вкладам от двух микроповерхностей с нормальными n_1 и n_2 . Вклад $E_{\text{kin}}(\theta, \varphi)$ от микроповерхности с нормалью n_1 будет таким же, как от плоской поверхности (в нашей модели определяется формулой (1)). Вклад от микроповерхности с нормалью n_2 будет иметь более сложный вид

$$E_{\text{kin}}(\theta, \varphi) = E_{\text{kin}}(\Theta(\theta, \varphi), \Phi(\theta, \varphi)), \quad (3)$$

где

$$\Theta(\theta, \varphi) = \arccos(\cos \gamma \cos \theta + \sin \gamma \sin \theta \cos \varphi),$$

$$\Phi(\theta, \varphi) = \text{arcctg}(\cos \gamma \text{ctg} \theta - \sin \gamma \text{ctg} \varphi).$$

Эти соотношения справедливы для распределений произвольной формы, однако необходимо отметить, что для данной геометрии (рис. 2, *a*) угол γ следует считать отрицательным.

На рис. 2, *d* показано сечение распределения фотоэлектронов в направлении, перпендикулярном линии изгиба поверхности, т.е. при $\varphi = 0, \pi$, при различных энергиях фотонов. Очевидно, что нижние точки кривых, соответствующие нормальной эмиссии с различных микроповерхностей, остаются неподвижными при изменении $h\nu$ и разнесены на величину угла γ . Если теперь

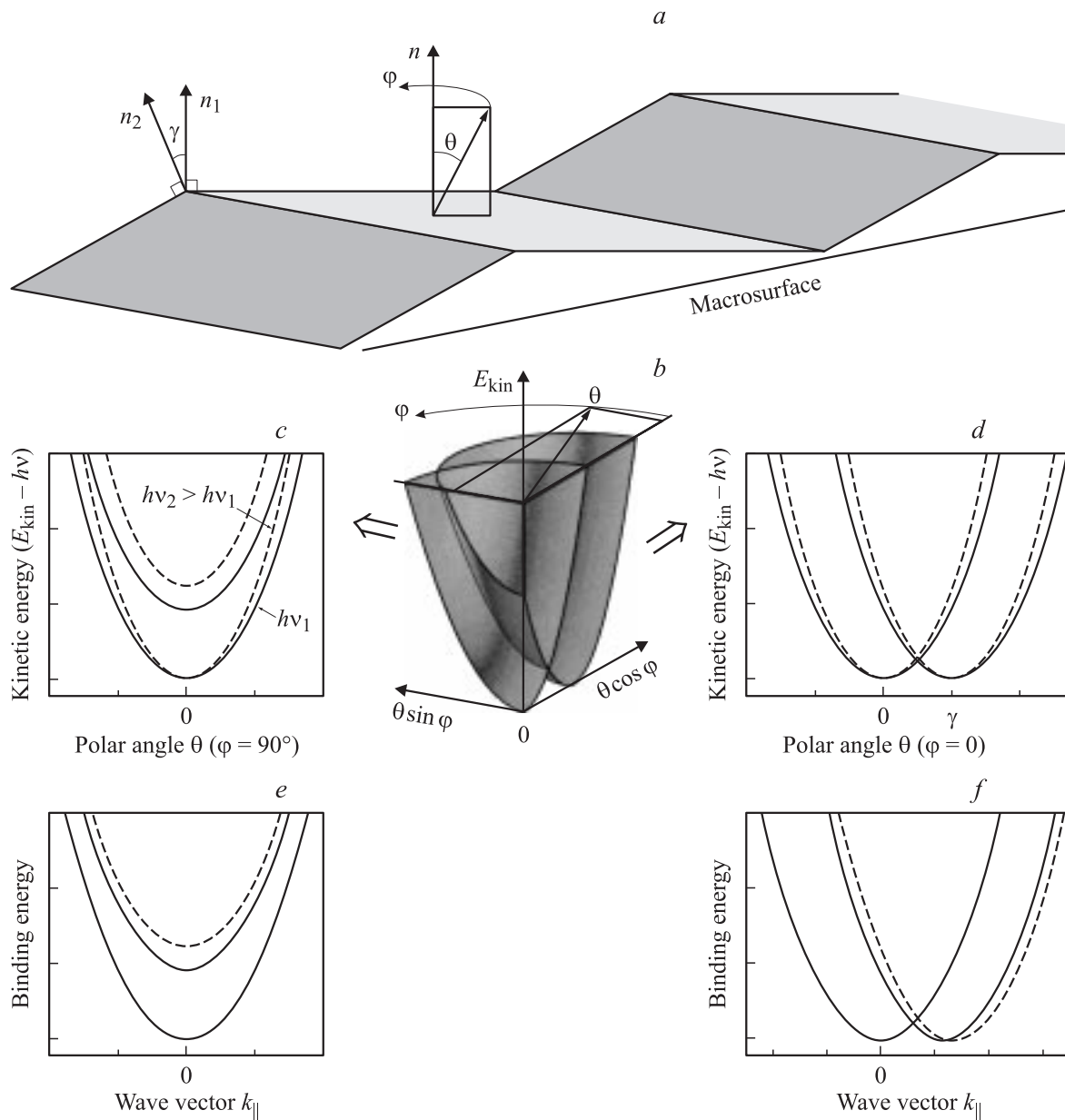


Рис. 2. Схема формирования фотоэлектронных спектров для геометрически неоднородной поверхности. *a* — модель тонкой пленки со сложным рельефом; *b* — изображение модельного распределения фотоэлектронов аналогично рис. 1, *b*; *c* и *d* — сечения распределения фотоэлектронов в направлении $\varphi = \pi/2$ и 0 соответственно; *e* и *f* — результат расчета $E(k)$ путем формального применения соотношений (2) для направлений $\varphi = \pi/2$ и 0 соответственно.

на основании измеренных угловых зависимостей формально построить „дисперсионные зависимости“ $E(k_{\parallel})$ с помощью соотношений (2), получим кривые, показанные на рис. 2, *f*. Совершенно ясно, что достоверную информацию об электронной структуре будет давать только центральная кривая. Вклад от второй микроповерхности окажется непараболическим и сдвинутым на величину, зависящую от энергии фотонов. Достоверная информация об электронной структуре второй микроповерхности тем не менее может быть получена, если в зависимости $E_{\text{kin}}(\theta)$ за начало отсчета угла принять угол, соответствующий нижней точке второй кривой.

При измерении в направлении, параллельном линии изгиба поверхности ($\varphi = \pi/2, 3\pi/2$), в сечении распределения фотоэлектронов также имеются две кривые. Однако в отличие от предыдущего случая обе они симметричны относительно выбранной нормали (рис. 2, *c*). Здесь также достоверна только одна кривая (нижняя), соответствующая микроповерхности с нормалью n_1 . Вклад от второй микроповерхности в нашем случае параболической дисперсии оказывается расположенным выше по шкале энергии, причем энергетическое положение зависит от $h\nu$. Единственный способ получить достоверную информацию об электронной структуре

второй микроповерхности для данного направления — провести измерения, выбрав в качестве нормали перпендикуляр n_2 .

Ситуация значительно усложняется, если заранее неизвестна геометрия исследуемой поверхности. Тогда ее анализ с помощью ФЭС становится невозможным без привлечения дополнительных методик исследования, например сканирующей туннельной микроскопии (СТМ).

Теперь обратимся к анализу экспериментальных результатов, полученных для систем с монослойным графитовым покрытием на ступенчатых поверхностях Ni(771) и Ni(755). Эти системы превосходно подходят для иллюстрации выводов и закономерностей, полученных в рамках рассмотренной простой модели. Причины этого следующие.

1) Поверхности Ni(771) и Ni(755) претерпевают фасетирование при формировании на них монослоя графита, при этом образуется поверхность с геометрической структурой, близкой к модельной (см. далее).

2) Монослой графита покрывает эти поверхности подобно сплошному „ковру“ (см. далее).

3) Дисперсионная зависимость π -электронных состояний монослоя графита на металлической поверхности близка к параболической [7,8].

4) Дисперсии π -электронных состояний монослоя графита на разных гранях Ni очень близки.

3. Условия эксперимента

Атомарно-чистые, хорошо упорядоченные поверхности Ni(771) и Ni(755) были получены с помощью чередования циклов травления поверхностей монокристаллов ионами Ag^+ с кратковременным прогревом до температуры около $600^\circ C$. Качество поверхности контролировалось с помощью дифракции медленных электронов (ДМЭ). Монослой графита формировался на поверхностях Ni(755) и Ni(771) методом крекинга пропилена при парциальном давлении пропилена 10^{-6} Torr, температуре образца $480^\circ C$ и времени экспозиции 5 min. Исследование электронной энергетической структуры образца проводилось с помощью ФЭСУР в сверхтонком вакууме при давлении около $2 \cdot 10^{-10}$ Torr. Измерения проводились на канале вывода синхронного излучения RGLB, BESSY II [9] с монохроматическим светом при энергиях фотонов 55 и 65 eV со смешанной s - и p -поляризацией света. Для измерений использовался полусферический анализатор VG Escalab с угловым разрешением 1° и энергетическим разрешением 0.1 eV. Исследование геометрии поверхности проводилось с помощью сканирующего туннельного микроскопа Omicron VT SPM. Данные СТМ и ФЭС получены для систем, приготовленных в различных экспериментальных установках по одной и той же технологии в одинаковых экспериментальных условиях. В качестве индикатора соответствия формируемых систем использовались карты ДМЭ.

4. Экспериментальные результаты

4.1. Атомная структура поверхностей Ni(771) и Ni(755). Ступенчатые поверхности Ni(771) и Ni(755) представляют собой поверхности монокристаллов Ni, срезанные под углом 5.77° для Ni(771) и 9.45° для Ni(755) по отношению к базовым поверхностям Ni(110) и Ni(111) соответственно. Геометрическая структура таких поверхностей образована периодическими ступеньками монокристаллической высоты и показана на рис. 3, *a, b*. Исследование чистых поверхностей с помощью ДМЭ свидетельствует о том, что они являются стабильными по меньшей мере в интервале температур $20-500^\circ C$ для Ni(771) и $300-500^\circ C$ для Ni(755). Террасы, расположенные между ступенями, имеют структуру, характерную для базовых поверхностей Ni(110) и Ni(111). Периодичность ступеней определяется базовой плоскостью и углом среза и составляет 12.4 \AA для обеих поверхностей Ni(771) и Ni(755).

Возникает вопрос: какого типа структурная перестройка возможна для таких поверхностей при наличии адсорбата? Естественно предположить, что перестройка происходит по неким наиболее плотно упакованным граням, возможным для данных поверхностей. Как видно из рис. 3, *b*, для поверхности Ni(771) в качестве таковых можно рассматривать плоскости (111) и (331), образующие с поверхностью (110) (или плоскостью террас) углы 35.26 и 13.26° соответственно. Для кристалла с поверхностью (755) можно выделить плоскости (110) и (311), которые по отношению к плоскости (111) (или плоскости террас) расположены под углами 54.74 и 29.50° соответственно (рис. 3, *a*). Поскольку в процессе структурной перестройки усредненное направление макроповерхности неизменно, следует ожидать переход от ступенек монокристаллической высоты к ступенькам многоатомной высоты. При этом кристаллическая структура таких многоатомных ступенек будет соответствовать направлениям плотной упаковки, отмеченным выше. На рис. 3, *d* и *c* приведены модели фасетированных поверхностей, образованных с помощью плоскостей (331) и (311) из поверхностей (771) и (755) соответственно. При этом вторая сторона фасеток отвечает базовым плоскостям (110) и (111).

4.2. СТМ-изображения исследуемых перестроенных поверхностей. Для экспериментального определения геометрической структуры поверхностей Ni(771) и Ni(755) после формирования углеродного покрытия крекингом пропилена (см. выше) были проведены СТМ- и ДМЭ-исследования полученных поверхностей. На рис. 4, *a* и *b* приведены СТМ-изображения топографии данных поверхностей (светлые места соответствуют возвышениям). Видно, что после крекинга имеет место существенная перестройка поверхности систем с формированием крупных фасеток. Анализ показывает, что они ориентированы вдоль направления исходных ступенек $[1\bar{1}0]$ для обеих поверхностей. Сформированные фасетки неоднородны по

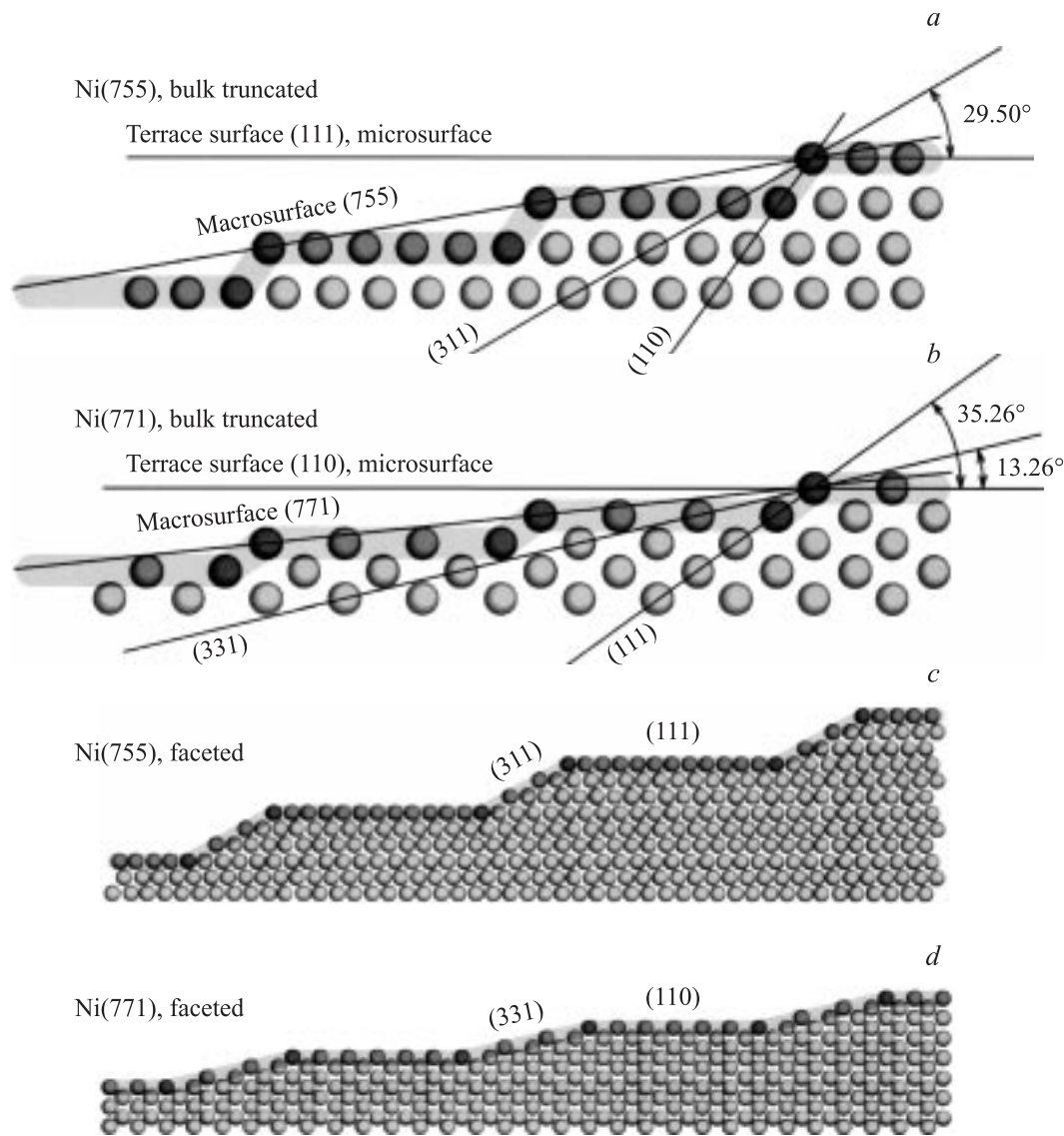


Рис. 3. Модели кристаллической структуры поверхностей Ni(771) и Ni(755). *a, b* — нефасетированные ступенчатые поверхности (мысленный срез объемных кристаллов); *c, d* — возможные варианты фасетированных поверхностей.

размерам, их ширина достигает ~ 100 nm для Ni(771) и ~ 50 nm для Ni(755). На рис. 4, *c* и *d* приведены поперечные сечения рельефа поверхностей, измеренные в направлениях, указанных на изображениях поверхностей соответствующими линиями. Анализ сечений показывает, что для поверхности Ni(771) подавляющее большинство фасеток образовано гранями, угол между которыми составляет $14 \pm 1^\circ$. Этот угол соответствует углу между плоскостью базовой террасы (110) и гранью (331). Расчетный угол между этими гранями составляет 13.26° (рис. 3, *b*). Кроме того, встречаются фасетки с углом между плоскостями, равным $34 \pm 2^\circ$, что соответствует углу между гранями (110) и (111). Расчетная величина угла между этими гранями составляет 35.26° . В сечении рельефа для поверхности Ni(755) видны фасетки, образованные плоскостями, угол между которыми составляет $29 \pm 2^\circ$, что соответствует рас-

четному углу между гранями (111) и (311), равному 29.50° (рис. 3, *a*). Таким образом, модель, представленная на рис. 3, отвечает реальной геометрии поверхностей Ni(771) и Ni(755), покрытых монослоем графита. Данные ДМЭ показывают, что топография поверхностей остается неизменной в интервале температур $20\text{--}480^\circ\text{C}$.

4.3. Исследования фасетированных поверхностей методом ФЭСУР.

Ni(755). На рис. 5, *a* приведена серия фотоэлектронных спектров для системы с графитовым монослойным покрытием на поверхности Ni(755), измеренных при изменении полярного угла относительно нормали к базовой поверхности Ni(111) в направлении, перпендикулярном исходным ступеням, при энергии фотонов 55 eV. Как и предполагалось, в данном направлении можно выделить две ветви, генетически связанные с

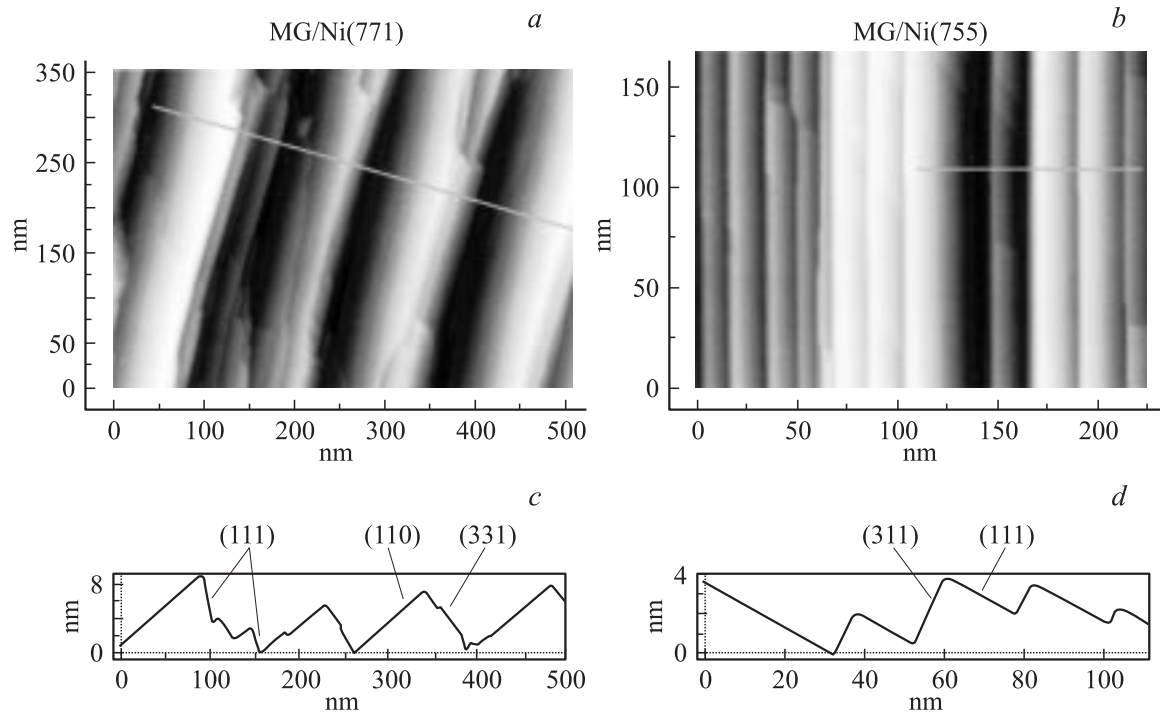


Рис. 4. СТМ-изображения рельефа поверхностей Ni (771) (*a*) и Ni (755) (*b*) после формирования на поверхностях монослойного графитового покрытия (MG) и поперечные сечения рельефа полученных поверхностей (*c, d*) вдоль линий, показанных на частях *a* и *b* соответственно.

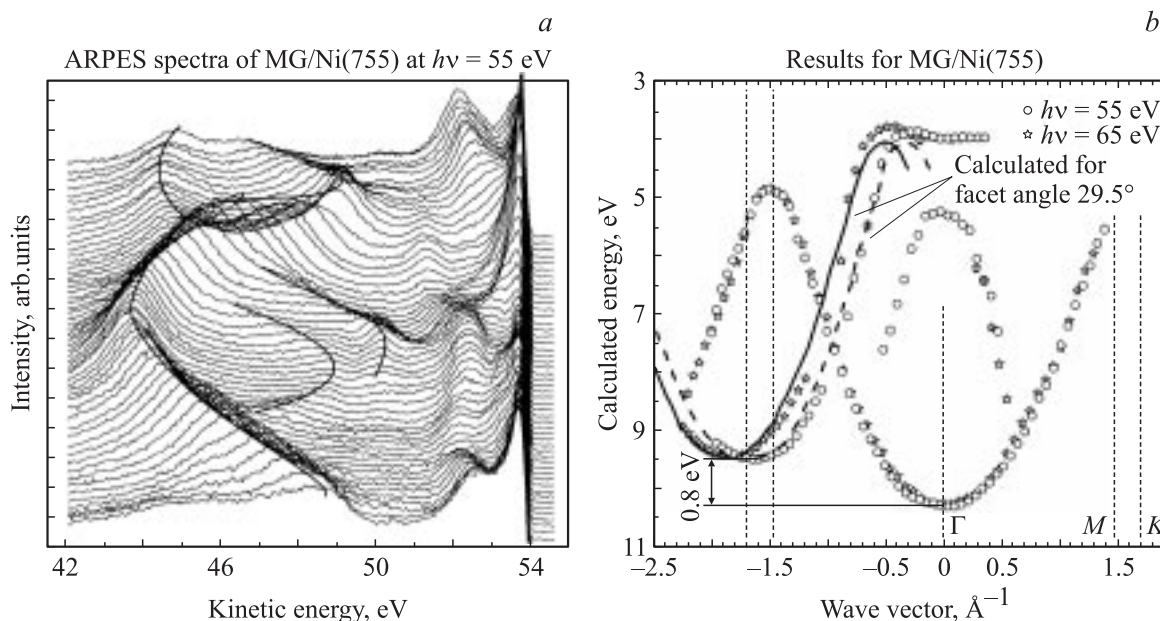


Рис. 5. Результаты измерений поверхности Ni (755) методом ФЭСУР в направлении, перпендикулярном исходным террасам. *a* — изображение серии измеренных фотоэлектронных спектров с углом θ в качестве параметра; *b* — результат расчета $E(k)$ при формальном применении соотношений (2).

π -состояниями графита, с центрами при различных значениях полярного угла. По полученным данным при формальном применении соотношений (2) построены зависимости $E(k_{\parallel})$ для различных энергий возбуждающих квантов ($h\nu = 55$ и 65 eV). Эти зависимости,

приведенные на рис. 5, *b*, рассчитаны относительно нормали к поверхности (111), т.е. к поверхности базовых террас, поэтому только ветвь, относящаяся к этой грани, является реальной дисперсионной кривой и правильно отражает электронную структуру. На рисунке можно

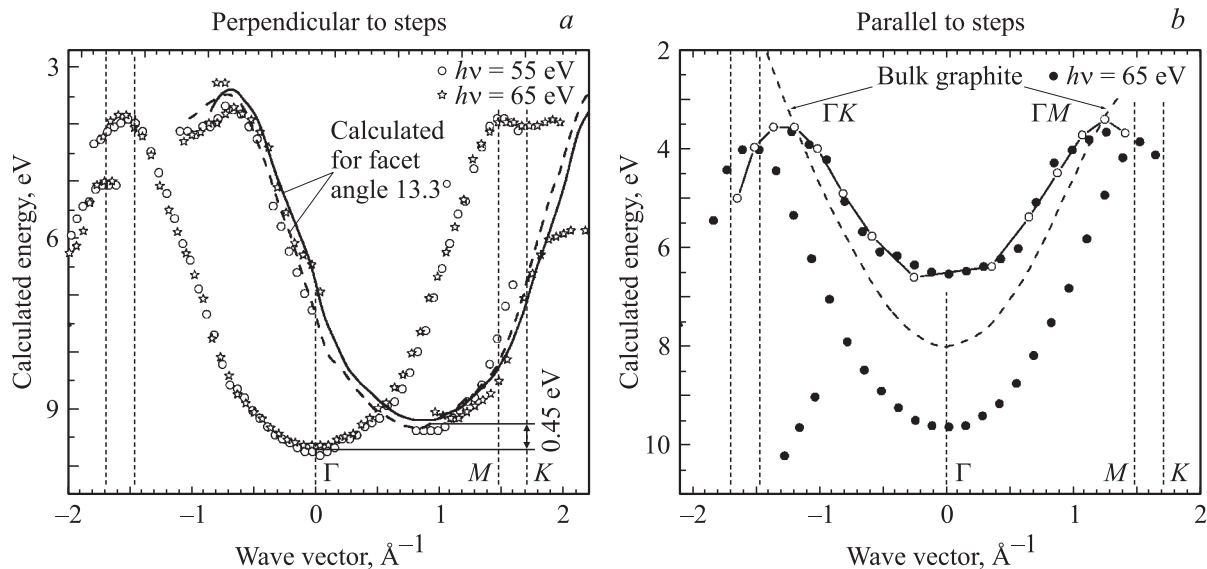


Рис. 6. Результаты расчета $E(k)$ с помощью соотношений (2) по фотоэлектронным спектрам для системы MG/Ni (771). a — в направлении, перпендикулярном исходным террасам; b — в направлении, параллельном исходным террасам.

выделить две ветви, сдвинутые относительно друг друга не только по углу (или величине k_{\parallel}), но и по энергии. Разница в энергиях связи π -электронов составляет около 0.8 eV. Сплошной и штриховой линиями показан расчетный вклад с учетом геометрии (полученной по формулам (3)) от второй грани фасетки (311) для $h\nu = 65$ и 55 eV соответственно в предположении, что формы дисперсионных кривых от двух граней идентичны, и с учетом наблюдаемого энергетического сдвига. Видно, что эти кривые хорошо совпадают с экспериментальными данными; значит, величина сдвига по k_{\parallel} соответствует разнице в полярных углах 29.5° и совпадает с моделью и результатами СТМ-измерений. Следует отметить, что смещенные ветви, построенные для $h\nu = 55$ и 65 eV, не совпадают. Это еще раз подтверждает, что параболы формируются за счет геометрического фактора, т.е. от двух граней фасетки (рис. 2, a). В случае электронных латеральных эффектов для нефасетированных ступенчатых поверхностей зависимости $E(k_{\parallel})$ при различных энергиях фотонов должны совпадать.

Ni (771). Аналогичные результаты были получены при анализе фотоэмиссионных спектров для системы с монослоем графита (MG) на поверхности Ni (771). Зависимости, построенные по формулам (2) для данной системы в направлениях, перпендикулярном и параллельном краям исходных ступеней, представлены на рис. 6, a и b соответственно. В направлении, перпендикулярном исходным ступеням, измерения проводились при тех же энергиях фотонов (55 и 65 eV). Как и в предыдущем случае, в этом направлении в спектрах можно выделить вторую ветвь от π -состояний графита, смещенную в сторону меньших энергий связи примерно на 0.45 eV. Сдвиг этой ветви относительно первой по шкале k_{\parallel} также зависит

от энергии фотонов, но для этой системы изменение положения в зависимости от $h\nu$ выражено менее ясно, поскольку угол между плоскостями фасеток значительно меньше и составляет 13.26° . Расчетные (по формулам (3)) вклады, построенные на основании данной величины угла и экспериментально наблюдаемого значения энергии связи для зоны π -состояний при $h\nu = 55$ и 65 eV, представлены на рис. 6, a штриховой и сплошной линиями соответственно. Эти кривые хорошо совпадают с экспериментальными зависимостями, что свидетельствует о том, что различия в форме дисперсии для монослоя графита на гранях (331) и (110) незначительны, и подтверждает правильность выбранной модели.

На рис. 6, b представлены соответствующие энергетические зависимости, измеренные (темные кружки) и рассчитанные (светлые кружки, соединенные линиями) для направления вдоль исходных ступеней. Здесь также можно выделить две ветви, но расположенные симметрично относительно нормали к террасе и существенно сдвинутые по шкале энергии (рис. 2, e). Расчетный вклад от второй грани для угла 13.26° показан сплошной линией и хорошо совпадает с экспериментальной кривой. При расчете предполагалось, что дисперсия π -состояний графита на обеих гранях одинакова с точностью до сдвига по энергии 0.45 eV и симметрична по всем направлениям зоны Бриллюэна. Наличие дополнительной ветви в данном направлении является характерной особенностью фасеток, поскольку для упомянутых выше структур с латеральной сверхрешеткой на нефасетированных ступенчатых поверхностях с монокристаллическими ступеньками таких ветвей быть не должно ввиду отсутствия сверхпериодичности в данном направлении. Таким образом, полученные зависимости являются удобным индикатором фасетирования поверхности системы.

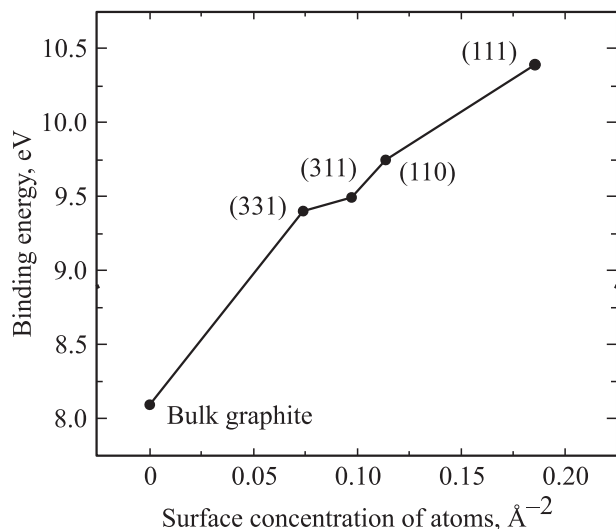


Рис. 7. Энергия связи в точке Γ зоны Бриллюэна для π -электронов монослоя графита, адсорбированного на различных кристаллографических гранях Ni, в зависимости от поверхностной концентрации атомов подложки.

Из дисперсионных зависимостей видно, что энергия π -зоны графита различна для разных кристаллографических граней Ni и существенно превышает энергию связи в объемном графите (рис. 5, *b*, 6, *a* и *b*). Для того чтобы выяснить характер данной энергетической зависимости, будем характеризовать положение дна π -зоны графита энергией в точке Γ зоны Бриллюэна для различных граней монокристалла Ni. В качестве количественной характеристики данной плоскости кристалла будем использовать поверхностную концентрацию атомов, образующих верхний моноатомный слой рассматриваемой грани. На рис. 7 приведена зависимость измеренного положения дна π -зоны графита от соответствующей поверхностной концентрации атомов подложки. Здесь энергия связи в объемном графите условно поставлена в соответствие с нулевой концентрацией атомов подложки, поскольку взаимодействие между соседними слоями графита несущественно по сравнению с взаимодействием графита и никеля. Видно, что имеет место почти прямая пропорциональность между энергией связи дна зоны π -состояний графита на поверхности Ni и поверхностной концентрацией атомов подложки. Таким образом, можно отметить, что чем больше атомов подложки, „соприкасающихся“ с адсорбатом, тем сильнее взаимодействие между атомами подложки и графитовым покрытием. Это взаимодействие проявляется в соответствующем сдвиге энергии связи π -состояний графита.

5. Заключение

На примере простой модели были выявлены основные особенности формирования экспериментально полученных фотоэлектронных спектров с угловым разрешением для геометрически неоднородных поверхностей. Показа-

но, что при формальном построении дисперсионных кривых с помощью соотношений, справедливых для плоской поверхности, появляются дополнительные ветви, не отражающие истинной электронной структуры поверхности, а лишь генетически связанные с ней. Эти ветви имеют характерную зависимость от энергии фотонов и при правильной интерпретации дают определенную количественную информацию как об электронной, так и о геометрической структуре поверхности.

Для иллюстрации этих закономерностей на примере реальной физической системы методами ФЭС и СТМ были исследованы ступенчатые поверхности Ni(771) и Ni(755) с монослойным графитовым покрытием. Показано, что при формировании такого покрытия методом крекинга пропилена происходит фасетирование подложки. Формирование фасеток происходит по наиболее плотно упакованным граням монокристалла никеля, максимально близким по углу к базовой поверхности исходных террас. Выявлены основные особенности в фотоэлектронных спектрах, отражающие результат фасетирования. Показано, что в направлении, перпендикулярном линии террас (или ступенек), в фотоэлектронных спектрах имеет место формирование двух ветвей угловых зависимостей, каждая из которых симметрична относительно своей нормали к микроповерхностям сформированных фасеток. В спектрах эти кривые сдвинуты на величину угла между плоскостями фасеток, что позволяет экспериментально определить этот угол и кристаллографические грани, из которых сформированы фасетки. В направлении, параллельном направлению террас (или ступенек), в фотоэлектронных спектрах также формируется два типа ветвей, но уже симметричных относительно нормали к макроповерхности. Отмеченные особенности фотоэлектронных спектров служат индикатором фасетирования поверхности системы и мерой характеристики геометрических параметров сформированных фасеток.

Список литературы

- [1] V.A. Shchukin, D. Bimberg. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1125 (1999).
- [2] A. Mugarza, A. Masaraque, V. Repain, S. Rousset, K.N. Altmann, F.J. Himpsel, Yu.M. Koroteev, E.V. Chulkov, F.J. Garcia de Abajo, J.E. Ortega. *Phys. Rev. B* **66**, 245 419 (2002).
- [3] A.M. Shikin, S.A. Gorovikov, V.K. Adamchuk, W. Gudat, O. Rader. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 256 803 (2003).
- [4] H.-C. Jeong, E.D. Williams. *Surf. Sci. Rep.* **34**, 171 (1999).
- [5] E. Rokuta, Y. Hasegawa, A. Itoh, K. Yamashita, T. Tanaka, S. Otani, C. Oshima. *Surf. Sci.* **427–428**, 97 (1999).
- [6] Th. Seyller, K.V. Emtsev, K. Gao, F. Speck, L. Ley, A. Tadich, L. Broekman, J.D. Riley, R.C.G. Leckey, O. Rader, A. Varykhalov, A.M. Shikin. *Surf. Sci.* In press.
- [7] A.M. Shikin, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk, F. Moresco, K.-H. Rieder. *Phys. Rev. B* **62**, 13 202 (2000).
- [8] A. Nagashima, N. Tejima, C. Oshima. *Phys. Rev. B* **50**, 17 487 (1994).
- [9] S.I. Fedoseenko, D.V. Vyalikh, I.E. Iossifov, R. Follath, S.A. Gorovikov, R. Puttner, J.-S. Schmidt, S.L. Molodtsov, V.K. Adamchuk, W. Gudat, G. Kaindl. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* **505**, 718 (2003).