

10;11;12

Дифракционные картины электронов, квазиупругорассеянных на адсорбированных фуллеренах

© М.В. Гомоюнова, И.И. Пронин, Н.С. Фараджев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 2 декабря 1996 г.

Рассчитаны дифракционные картины электронов с энергией 2 кЭв квазиупругорассеянных на молекулах C_{60} , адсорбированных на поверхности твердого тела. Показано, что в случае достаточно сильной связи молекул с подложкой симметрия этих картин позволяет однозначно определить ориентацию адсорбированных фуллеренов. Предложен новый эффективный способ моделирования дифракционных картин, основанный на феноменологическом учете эффекта фокусировки рассеянных электронов.

Эффект фокусировки электронов средней энергии (forward-focusing effect), проявляющийся в концентрировании эмитируемых кристаллом электронов вдоль наиболее плотноупакованных цепочек атомов, широко используется в структурном анализе поверхности. Именно на нем базируются методы дифракции фото- и Оже-электронов [1–3], а также дифракции обратнорассеянных электронов [4,5], позволяющие получать информацию об исследуемом объекте в реальном пространстве. В самых последних работах [6,7] указанные методы были применены для определения ориентации молекул C_{60} , адсорбированных на поверхности монокристаллов. Это оказалось возможным потому, что для формирования данных дифракционных картин не требуется дальний порядок и, если весь ансамбль адсорбированных фуллеренов имеет преимущественную ориентацию, наблюдаемая на эксперименте картина характеризует отдельные молекулы.

Настоящее исследование является продолжением работы [7], в которой ориентация фуллеренов определялась из анализа пространственных распределений квазиупругорассеянных электронов. При этом сам вид наблюдавшейся дифракционной картины позволил упростить решение задачи, сведя ее к рассмотрению лишь одной из возможных ориентаций

адсорбированной молекулы. Здесь мы проанализировали более общий случай и смоделировали дифракционные картины для всех наиболее вероятных ориентаций адсорбированных молекул C_{60} . Предложен также новый способ моделирования дифракционных картин от одиночных фуллеренов, позволяющий в сотни раз ускорить расчеты по сравнению с ранее применявшейся моделью.

Рассмотрим сначала результаты, полученные для энергии 2 кЭв в рамках уже использовавшейся нами кластерной модели однократного рассеяния плоских электронных волн [7]. На первом этапе в реальном пространстве задаются координаты атомов исследуемого объекта (фуллерена с той или иной ориентацией относительно поверхности подложки). Каждый из этих атомов может принимать участие в обратном рассеянии падающих на фуллерен электронов и поэтому рассматривается как источник электронной волны, дающий вклад в дифракционную картину. Вероятность возбуждения таких источников полагается затухающей при проникновении электронов в глубь фуллерена по экспоненциальному закону $\exp(-z/\lambda)$, где λ — средняя длина свободного пробега электронов до неупругого рассеяния, которая вычислялась по формуле, приведенной в работе [8]. На следующем этапе рассматривалась фокусировка испускаемых этими источниками электронов в результате их взаимодействия с другими атомами фуллерена в процессе выхода в вакуум. При этом необходимые данные по амплитудам рассеяния и фазовым сдвигам были получены экстраполяцией расчетных значений, табулированных в работе [9]. Вычисление вкладов в картину от отдельных источников выполнялось путем суммирования амплитуд прямой и однократно рассеянных электронных волн. Общая интенсивность моделируемой картины для каждого направления регистрации электронов определялась некогерентным суммированием парциальных вкладов от всех атомов фуллерена. Вычисления проводились для всей полусферы обратного рассеяния с шагом в 1° по полярному и азимутальному углам.

Рассмотрено пять наиболее вероятных ориентаций адсорбированной молекулы C_{60} , при которых фуллерен обращен к поверхности подложки шестиугольником, пятиугольником, ребром между двумя шестиугольниками, ребром между пяти- и шестиугольником, а также лишь одним из атомов молекулы. Полученные результаты иллюстрируются рис. 1, на котором изображены дифракционные картины для первых трех случаев и показаны соответствующие им ориентации молекулы. Для удобства сопоставления с экспериментом (для чего предварительно требуется

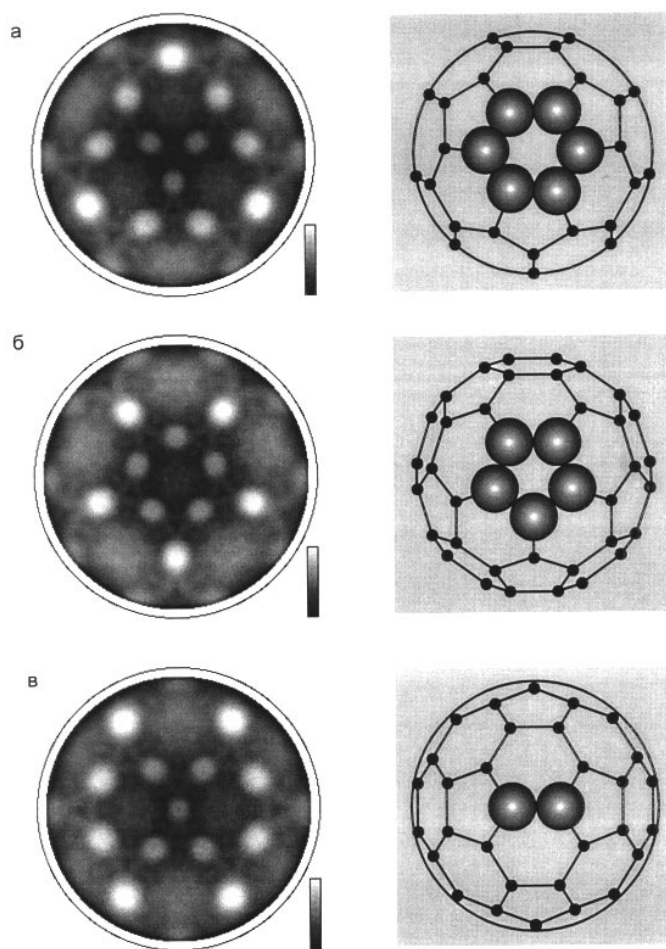


Рис. 1. Дифракционные картины, полученные в приближении плоских волн кластерной модели однократного рассеяния для некоторых вероятных ориентаций молекул C_{60} на поверхности твердого тела, показанных справа. Молекула обращена к подложке: *а* — гексагоном; *б* — пятиугольной гранью; *в* — ребром между пяти- и шестиугольником.

исключить вклад подложки [7]) численные данные представлены в виде двумерных карт распределения интенсивности отражения электронов по полярному и азимутальному углам вылета и даны в стереографической проекции. Центр круга соответствует нормали к поверхности подложки, а внешняя окружность — вылету электронов вдоль нее. При этом использована линейная шкала серых оттенков, в которой максимальному сигналу соответствует белый цвет, а минимальному — черный.

Проведенные расчеты дают четкие дифракционные картины с ярко выраженными особенностями, характерными для каждой из ориентаций. Анализ картин показывает, что во всех рассмотренных случаях наиболее интенсивные дифракционные пятна возникают вдоль ребер адсорбированной молекулы, т. е. вдоль направлений, соответствующих минимальным расстояниям между эмитирующим и рассеивающим атомами, когда реализуются оптимальные условия для проявления фокусировки электронов. Наряду с отмеченными максимумами отражения электронов имеются и более слабые особенности в дифракционных картинах, соответствующие направлениям вдоль внутренних диагоналей усеченного икосаэдра. Следует подчеркнуть и различия в симметрии полученных кичуки-картин. Симметрия картины определяется порядком оси вращения молекулы, совпадающей с нормалью к поверхности подложки. В случае, когда молекула C_{60} обращена к подложке шестиугольником, эта ось характеризуется тройной симметрией. При адсорбции молекулы пятиугольной гранью возникает симметрия пятого порядка, а при посадке молекулы на ребро — симметрия вращения второго порядка. Таким образом, геометрия и симметрия дифракционной картины однозначно связаны с ориентацией адсорбированного фуллерена относительно подложки.

Непосредственное проявление внутренней структуры молекулы в дифракционной картине позволяет использовать для ее расчета предельно упрощенную модель. В ней на феноменологическом уровне учитываются акты когерентного рассеяния лишь на атомах, лежащих вблизи линии, соединяющей эмиттер с рассматриваемым направлением, для которого вычисляется интенсивность картины. При этом считается, что интенсивность такого рассеяния обратно пропорциональна расстоянию между источником и рассеивающим атомом, а ее угловой профиль описывается функцией Гаусса с постоянной дисперсией, и проводится суммирование вкладов от всех атомов фуллерена.

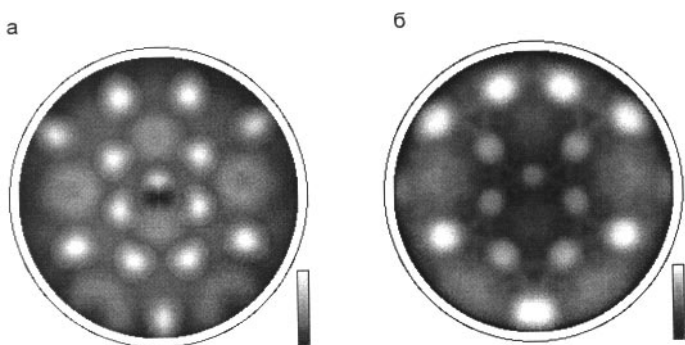


Рис. 2. Расчетные дифракционные картины, полученные в двух моделях: *а* — в модели, феноменологически учитывающей фокусировку электронов на атомных цепочках, *б* — в приближении плоских волн кластерной модели однократного рассеяния. Адсорбированная молекула C_{60} обращена к поверхности одним атомом.

С помощью данной модели также были проведены расчеты для пяти указанных выше ориентаций адсорбированной молекулы. Результаты одного из них показаны на рис. 2, *а*. Приведенная дифракционная картина относится к случаю, когда фуллерен обращен к подложке лишь одним из своих атомов. Рядом для сравнения показана аналогичная картина, полученная в кластерной модели однократного рассеяния (рис. 2, *б*). Видно, что симметрия и общий вид этих картин сильно отличаются от приведенных на первом рисунке, что еще раз подтверждает справедливость сделанных выше выводов. Вместе с тем обращает на себя внимание большое сходство результатов, полученных с использованием разных моделей. Действительно, положения всех наиболее светлых пятен на рис. 2, *а* и *б* совпадают. Различия же касаются главным образом соотношения интенсивностей более слабо выраженных максимумов. Аналогичные результаты получались и в других рассмотренных случаях. Отсюда можно сделать вывод, что предложенная модель правильно учитывает основные факторы, влияющие на формирование рассматриваемых картин. Принимая во внимание, что с помощью данной модели можно рассчитать полную дифракционную картину фуллерена за время, меньшее минуты (при использовании персонального компьютера с про-

цессором 80486), этот подход должен оказаться весьма перспективным для выполнения расчетов с большим числом варьируемых параметров. В частности, данная модель может быть успешно использована для определения ориентации и более сложных по сравнению с молекулой C₆₀ адсорбированных фуллеренов. Ее применение также целесообразно при исследовании локализации атомов металлов в фуллеридах.

Работа выполнена в рамках Российской научно-технической программы "Фуллерены и атомные кластеры" (проект № 95093).

Список литературы

- [1] *Fadley C.S.* // *Synchrotron Radiation Research: Advances in Surface Science*. V. 1: Techniques / Ed. by R.Z. Bacharach. New York, Plenum Press, 1992. Ch. 9. P. 421–518.
- [2] *Egelhoff W.F.* // *Jr. Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* 1990. V. 16. N 3. P. 213–235.
- [3] *Chambers S.A.* // *Surf. Sci. Rep.* 1992. V. 16. P. 261–331.
- [4] *Erbudak M., Hochstrasser M., Wetli E.* // *Mod. Phys. Lett. B.* 1994. V. 8. N 28. P. 1759–1769.
- [5] *Гомоюнова М.В., Пронин И.И., Фараджев Н.С.* // *ЖЭТФ.* 1996. Т. 110. В. 1 (7). С. 311–321.
- [6] *Fasel R., Aebi P., Agostino R.G., Naumovic D., Osterwalder J., Santaniello A., Schlapbach L.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 76. N 25. P. 4733–4736.
- [7] *Гомоюнова М.В., Пронин И.И., Фараджев Н.С.* // *ФТТ.* 1996. Т. 38. № 8. С. 2549–2557.
- [8] *Seah M.P.* // *Surf. Interf. Anal.* 1985. V. 2. N 1. P. 85–98.
- [9] *Fink M., Gregory J.* *Atom. Data Nucl. Data Tables.* 1974. V. 14. N 1. P. 39–87.