

М. В. Кузнецов¹, И. И. Огородников¹, Д. Ю. Усачев², Л. В. Яшина³

¹ Институт химии твердого тела УрО РАН

² Московский государственный университет

³ Санкт-Петербургский государственный университет

e-mail: kuznetsov@ihim.uran.ru

ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ И ГОЛОГРАФИЯ КАК НОВЫЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ*

Поверхность занимает важное место в современной науке и технике. В качестве примера приведем катализ, где роль поверхности основополагающая. Ученым здесь важно знать позиции центров адсорбции, геометрию хемосорбированных молекул и реконструировать дизайн поверхности в целом. Другой пример – низкоразмерные системы и наноматериалы, такие как эпитаксиальные пленки, слои графена, слоистые соединения с уникальными свойствами (например, топологические изоляторы) и др.

Что важно знать о поверхности? Следует иметь сведения о химическом составе, атомной структуре, природе химических связей, электронной структуре, функциональных свойствах. Очевидные успехи в этой области связаны с развитием экспериментальных методов изучения поверхности и теоретических подходов ее моделирования. В настоящее время ведется поиск новых методов изучения поверхности, также расширяется круг объектов исследования с переходом от простых к более сложным системам, характеризующимся многообразием протекающих на поверхности реакций. В настоящем сообщении речь идет о новых перспективных методах 3D-визуализации атомной структуры поверхности твердых тел.

Рентгеновская фотоэлектронная дифракция (РФД) и голография (РФГ) – динамично развивающиеся методы, ориентированные на изучение атомной структуры поверхности твердых тел, в том числе наноструктур, формирующихся на поверхности в ходе адсорбции газов, эпитаксиального роста пленок и т. д.

* © Кузнецов М. В., Огородников И. И., Усачев Д. Ю., Яшина Л. В., 2020

Глубина анализа РФД и РФГ составляет единицы нанометров, что позволяет характеризовать позиции атомов, расположенных как на поверхности, так и под поверхностью. Замечательной особенностью является их чувствительность к сорту исследуемых атомов, а также выделенным химическим формам изучаемых элементов. Авторам данного сообщения удалось повысить возможности РФД и РФГ за счет объединения их сильных сторон и совершенствования методологии структурного анализа поверхности. Предложена оригинальная компьютерная программа XPDProcessor для работы с РФД и РФГ, позволяющая, в частности, строить в 3D-формате изображения атомной структуры на глубину 2–3 нм.

До недавнего времени эксперименты по фотоэлектронной голографии выполнялись лишь на простых объектах, например поверхностях чистых металлов. Исследовательская группа из Японии (Т. Matsushita и др.) предложила новый алгоритм SPEA-MEM, основанный на использовании матриц рассеяния и метода максимума энтропии, который достаточно универсален и может быть применен, в частности, для анализа фотоэлектронных голограмм.

В настоящем сообщении методами фотоэлектронной дифракции и фотоэлектронной голографии исследована и визуализирована атомная структура поверхностных слоев перспективных топологических изоляторов – слоистых кристаллов теллурида висмута (Bi_2Te_3). Получены экспериментальные дифракционные картины для электронов $\text{Bi}4f$ висмута и $\text{Te}4d$ теллура для ряда энергий возбуждающего излучения и рассчитаны теоретические картины дифракции. На их основе проведен анализ структуры поверхностных слоев кристалла и проведена реконструкция 3D-изображения атомной структуры ближайшего окружения вокруг атомов висмута и теллура, расположенных на глубине до 5 атомных слоев поверхности (рис. 1 и 2).

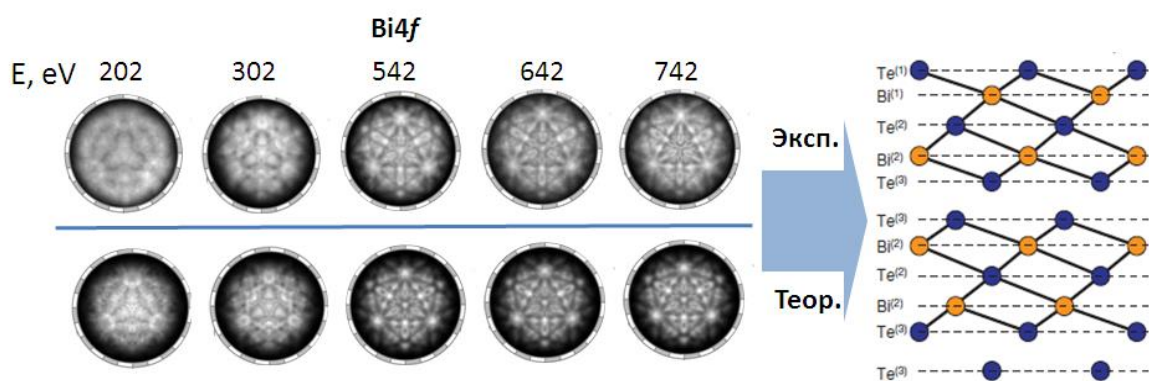


Рис. 1. Экспериментальные и теоретические картины фотоэлектронной дифракции $\text{Bi}4f$ -электронов на поверхности кристалла теллурида висмута (Bi_2Te_3) (111). Оптимизация структуры поверхности

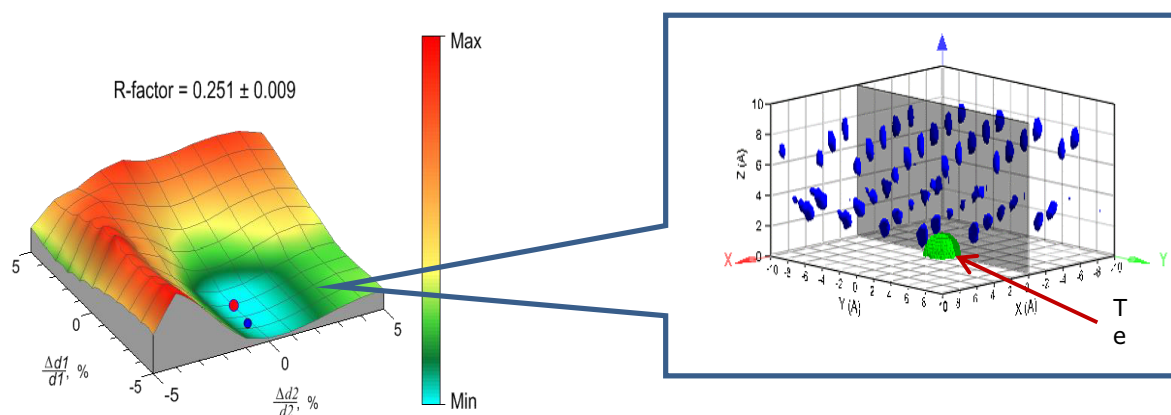


Рис. 2. Фотоэлектронная голография: 3D-реконструкция ближайшего окружения атомов теллура в поверхностных слоях теллурида висмута (Bi_2Te_3) (111) для точки оптимальных структурных параметров (межслоевых расстояний d_1 и d_2) поверхности кристалла