

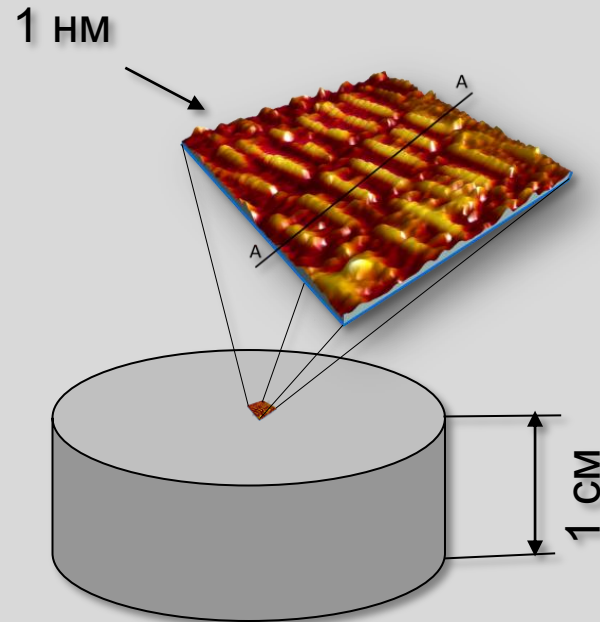
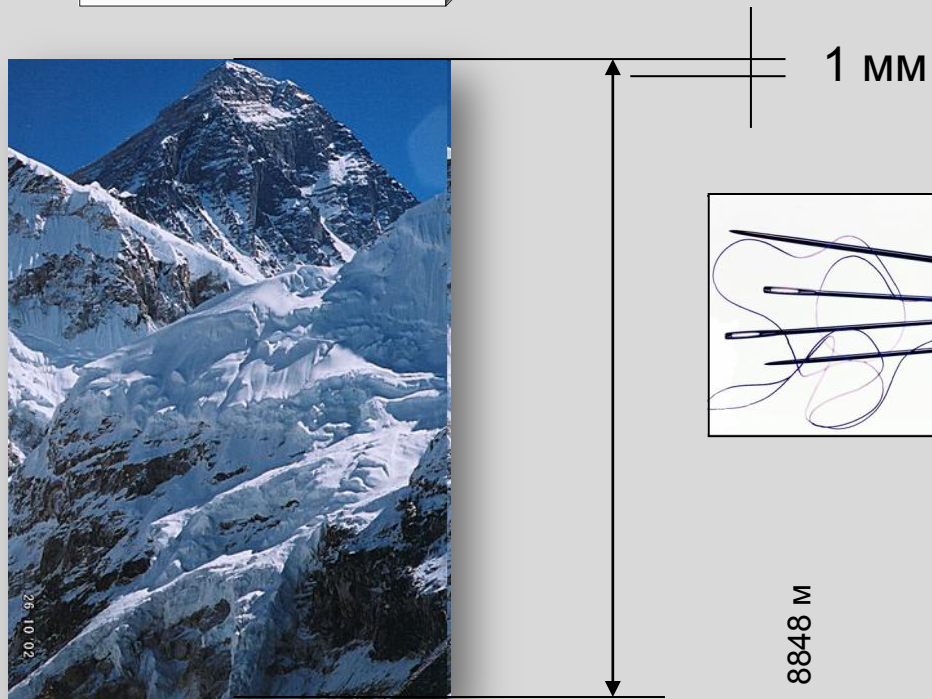
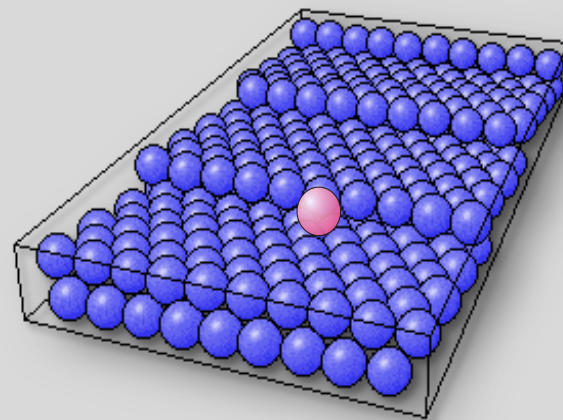
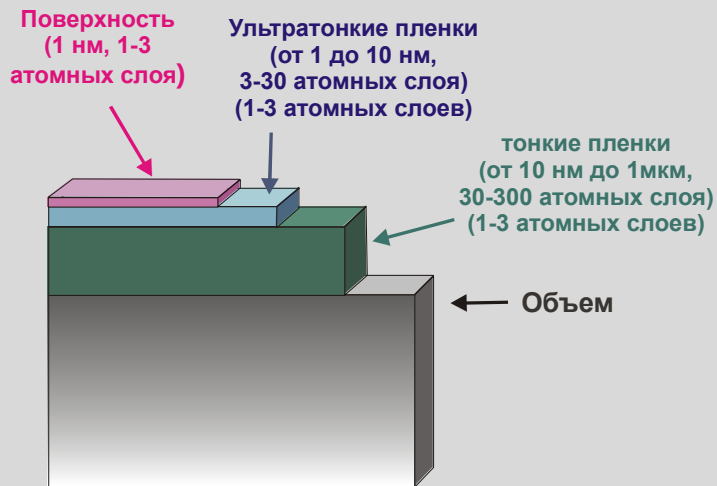
ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ, ДИФРАКЦИЯ И ГОЛОГРАФИЯ КАК МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

М.В.Кузнецов

- **Методы анализа поверхности:**
 - Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС)
 - Рентгеновская фотоэлектронная дифракция (РФД) и голография (ФГ);
 - Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ).
- **Фотоэлектронная дифракция и голография – методы структурного анализа поверхности:**
 - основные принципы метода;
 - техника эксперимента;
 - области применения;
- **Примеры совместного использования РФЭС, РФД и СТМ.**
- **Заключение**



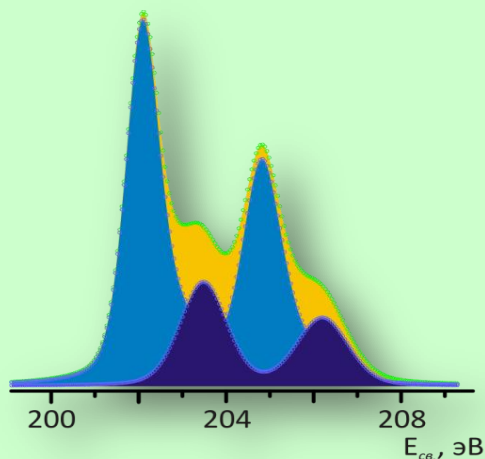
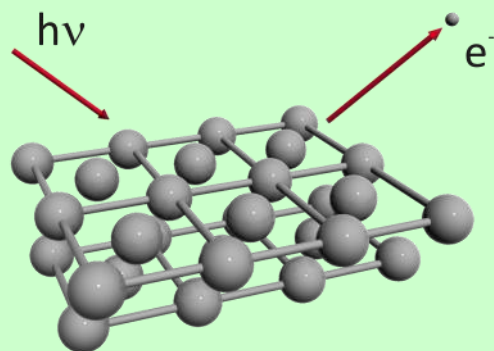
Что мы называем поверхностью?



Методы исследования поверхности 1T-TiSe₂

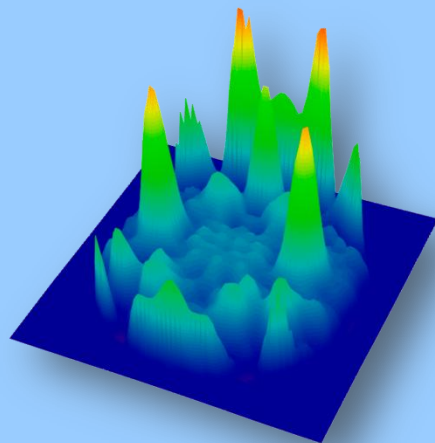
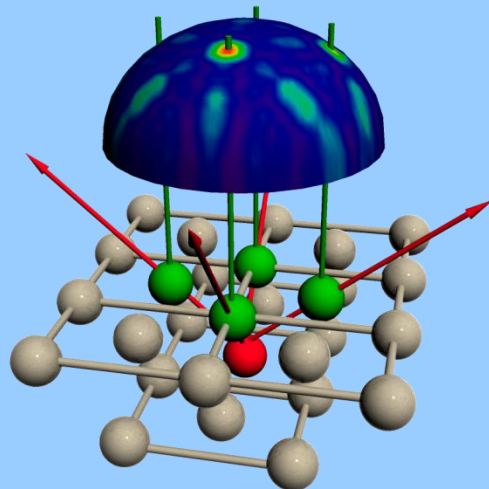


фотоэлектронная
спектроскопия
(XPS, AR PES)



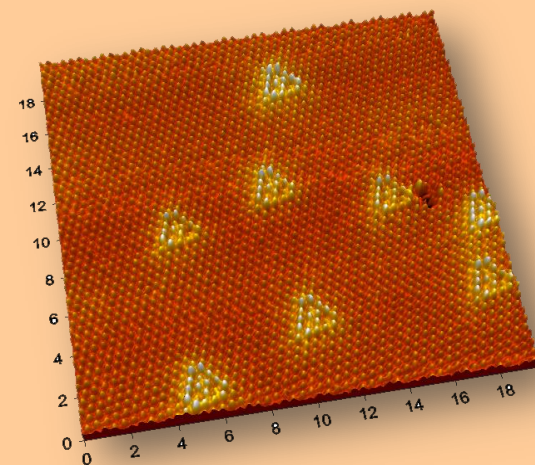
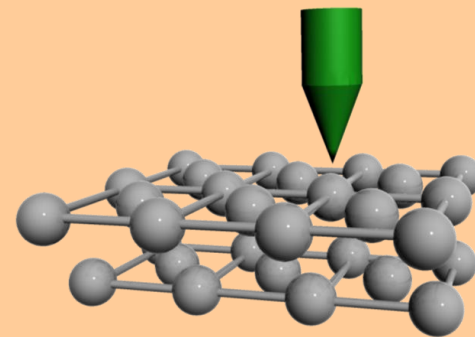
химический состав,
электронная структура,
химическая связь

фотоэлектронная дифракция
и голография
(XPD)



Структура
поверхностных слоев

STM - микроскопия



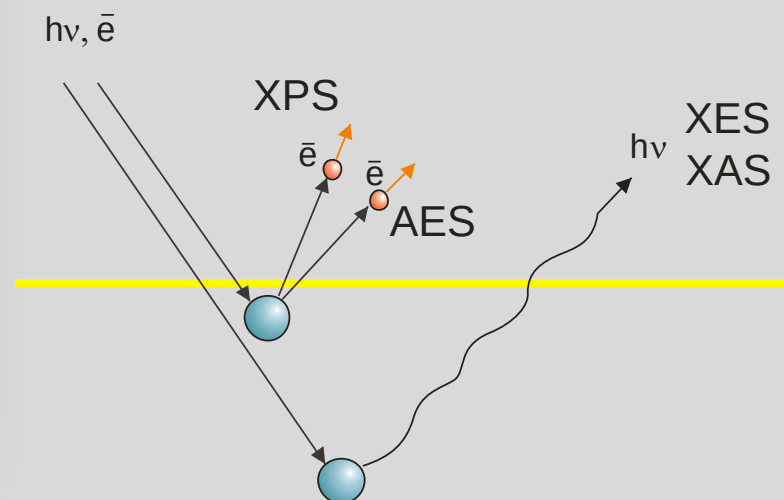
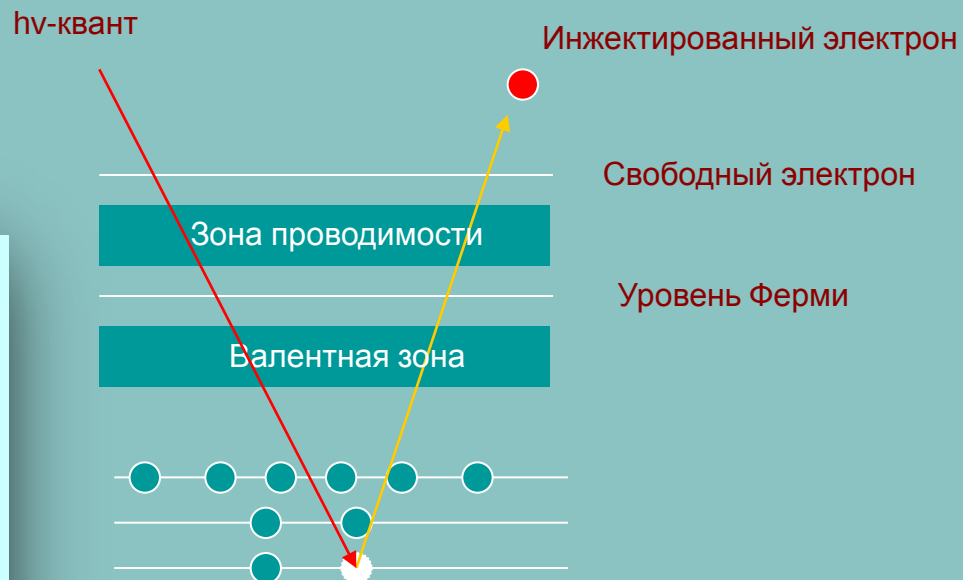
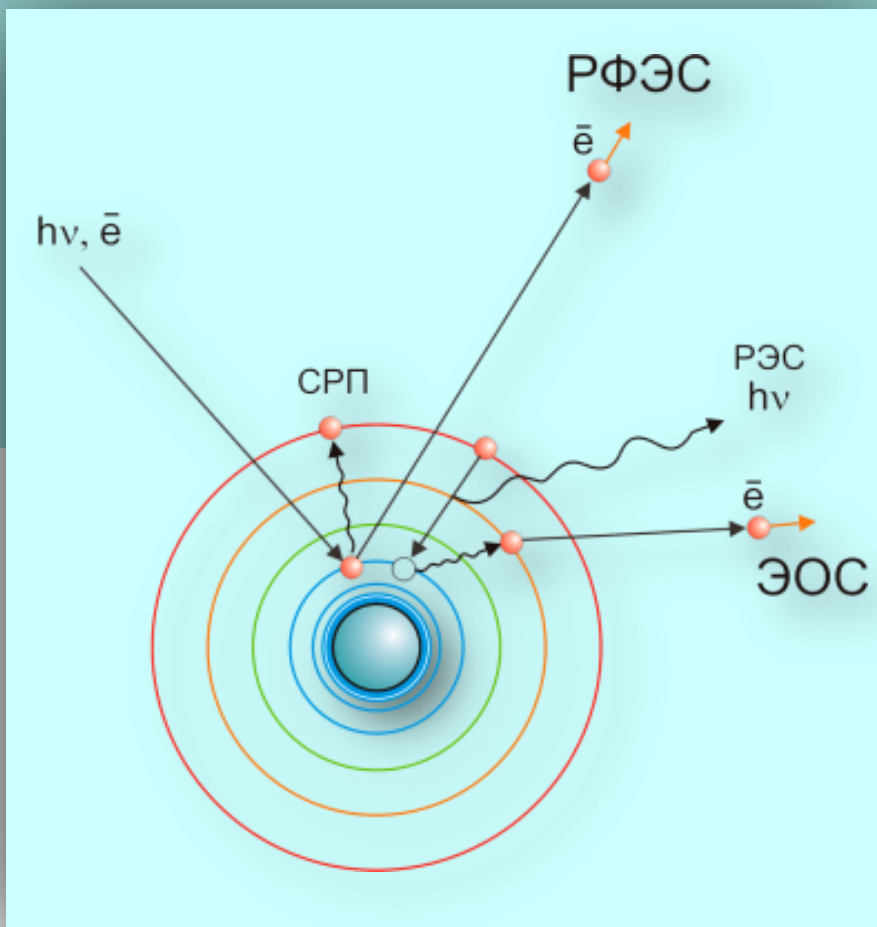
топология, атомная
структура поверхности

ESCALAB MK II + VT STM

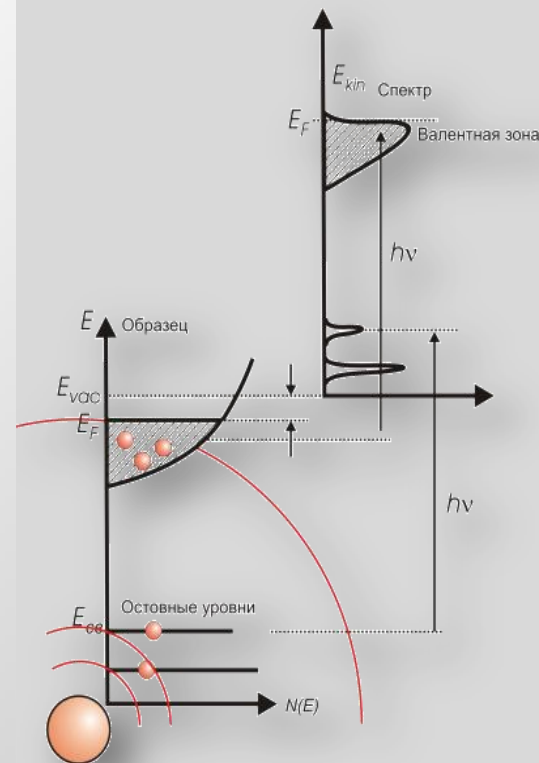
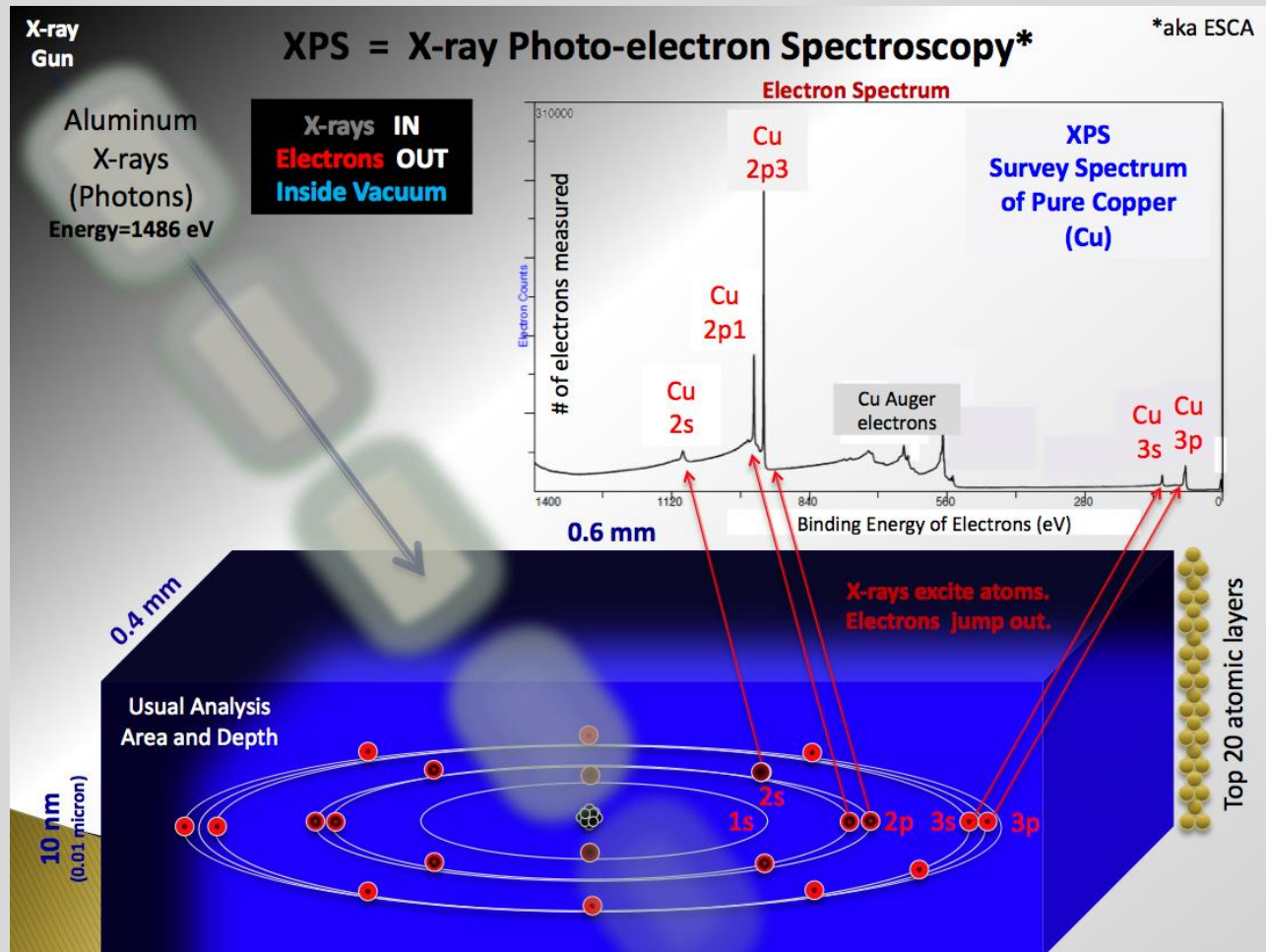
- РФЭС УР
- ЭОС
- РФД
- ВИМС
- СТМ
- Film deposition
- Surface preparation



$$h\nu = E_{\text{св}} + E_{\text{кин}} + \varphi_{\text{сп}}$$



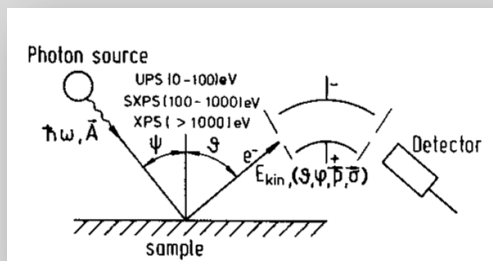
РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ (РФЭС УР)



Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта

$$h\nu = E_{CB} + E_{кин} + \varphi_{сп}$$

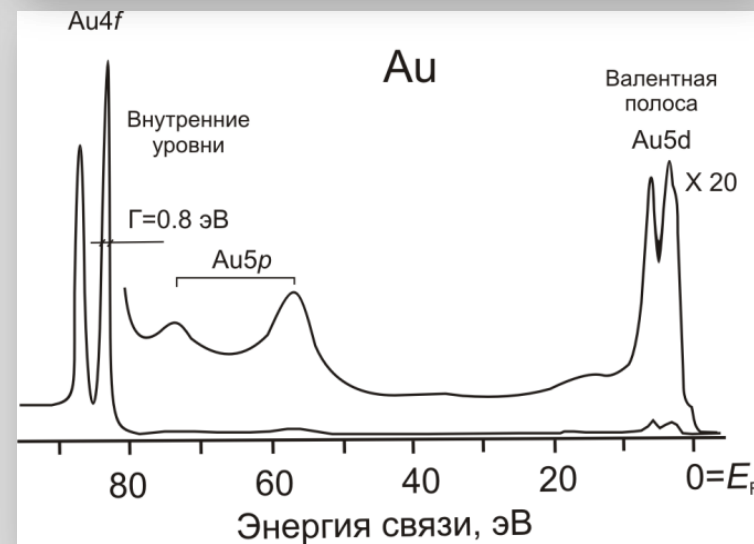
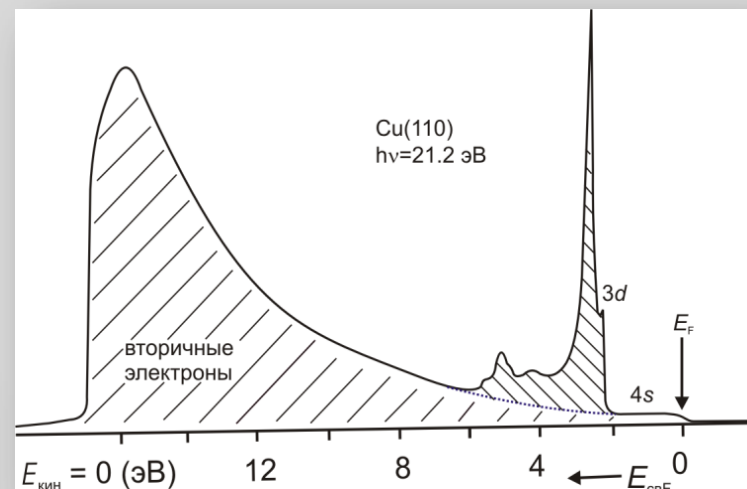
Источники УФ и рентгеновского излучения



Видимый свет:
Фиолетовый - 380 нм, 3 эВ
Красный – 760 нм, 1.5 эВ



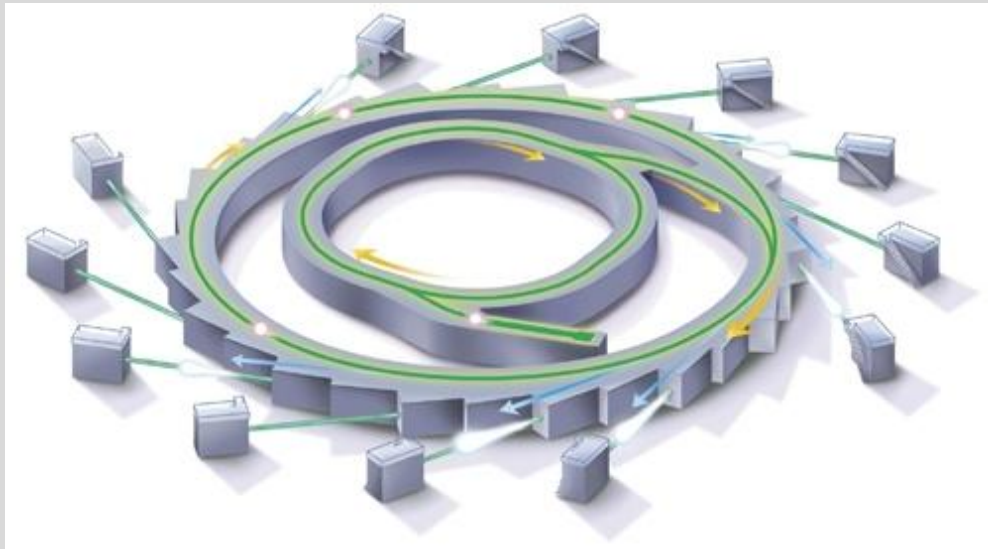
BESSY II, Berlin





Available X-ray Sources

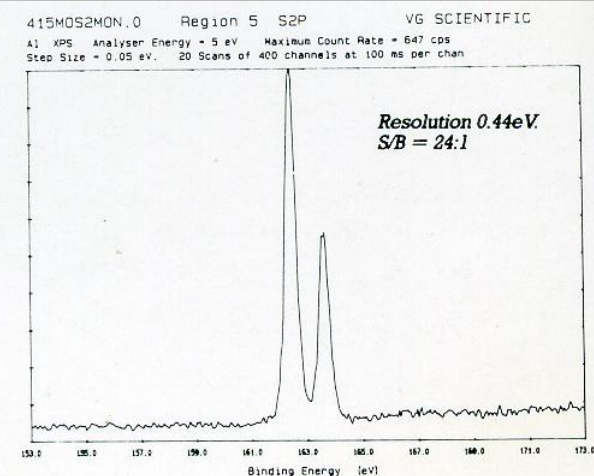
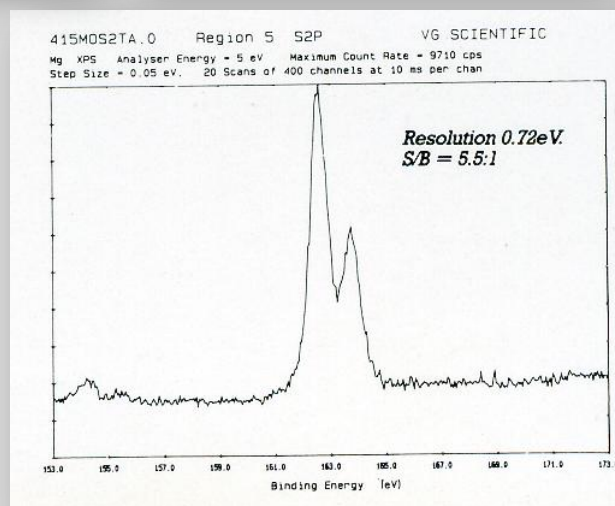
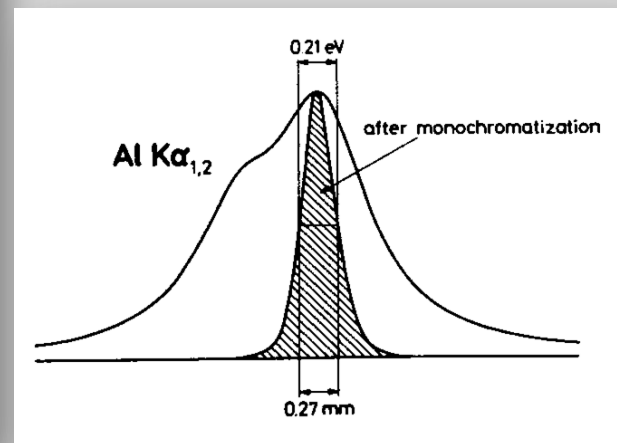
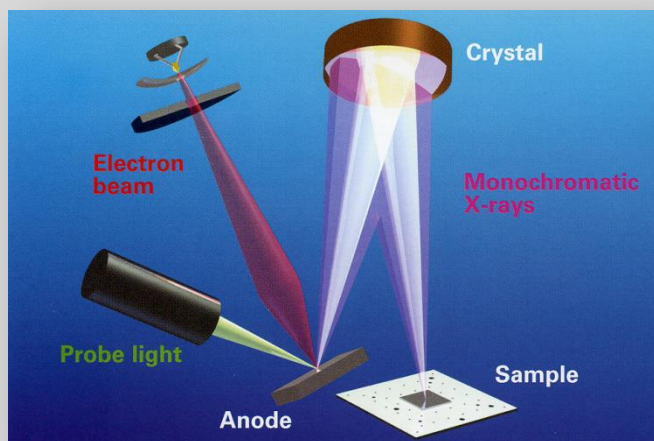
Material	Radiation	Energy	Line Width
Mg	K(alpha)	1253.6	0.7 eV
Al	K(alpha)	1486.6	0.85 eV
Zr	L(alpha)	2042.4	1.6 eV
Ag	L(alpha)	2984.3	2.6 eV
Ti	K(alpha)	4510.9	2.0 eV
Cr	K(alpha)	5,417	2.1 eV



Центры синхротронного излучения в мире



Рентгеновский источник с монохроматором





Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция (РФЭС+РФД):

- химический состав поверхности;
- профиль концентрации элементов по глубине
- валентность элементов на поверхности;
- структура поверхности;
- электронная структура валентной зоны

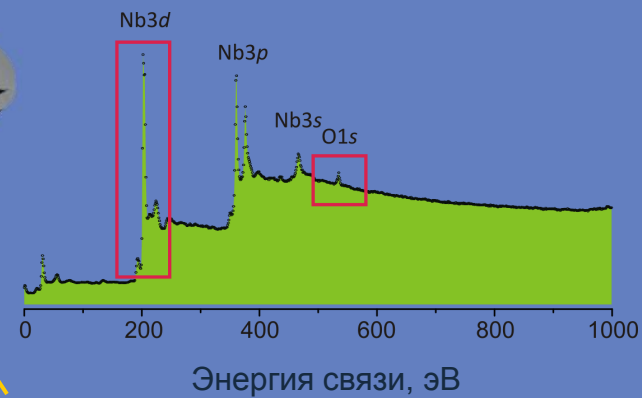


РФЭС УР - эксперимент

ESCALAB MK II

образец

Рентгеновская
трубка





РФЭС: химический состав поверхности твердых тел

- качественный анализ элементного состава поверхности;
- количественные оценки соотношения элементов в поверхностных слоях

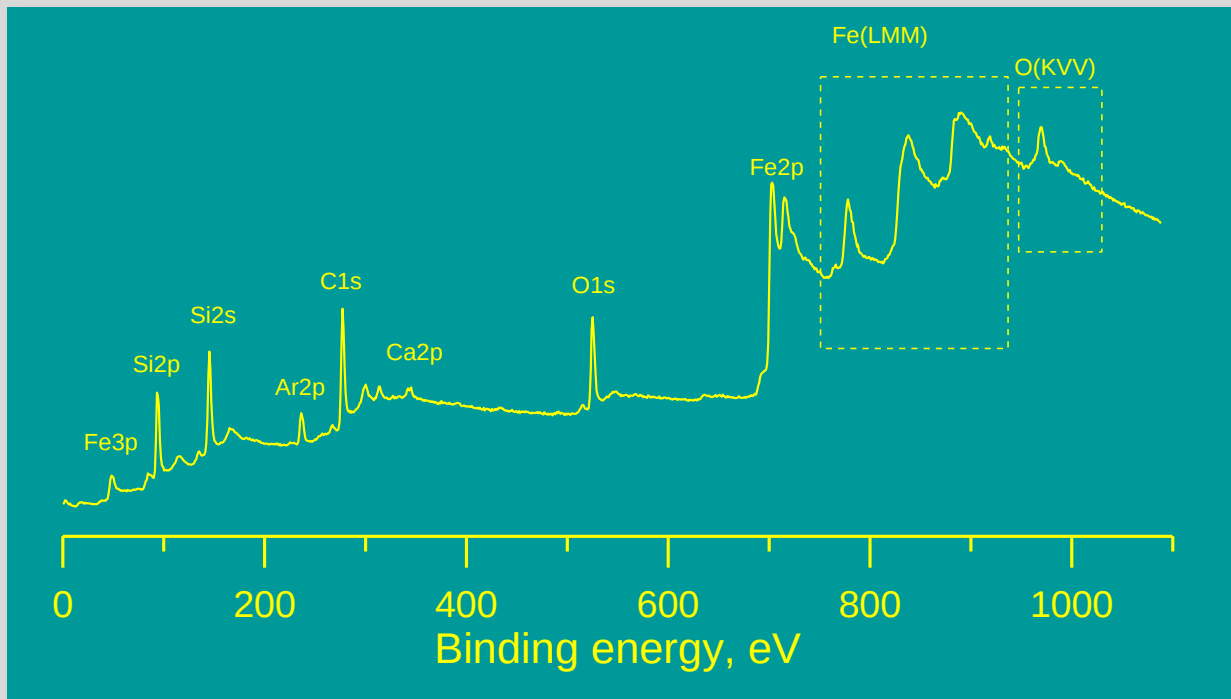
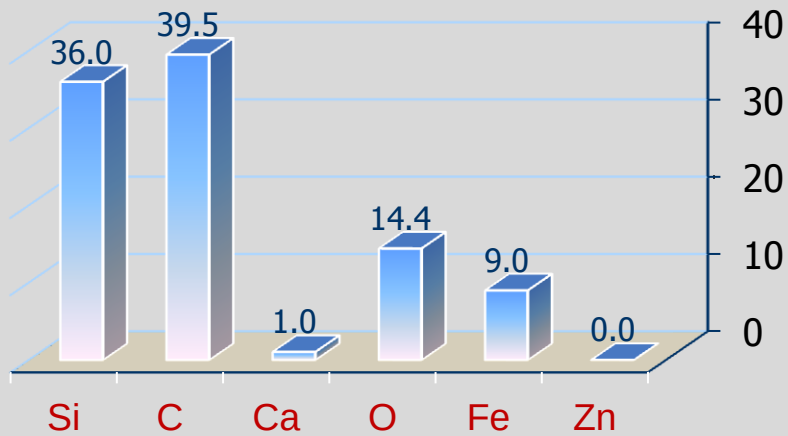
$$I = c \cdot \sigma \cdot T \cdot \left[1 - \frac{\beta}{2} \cdot \left(\frac{3}{2} \cdot \sin \theta - 1 \right) \right] \cdot \lambda \cdot k \cdot \exp(-d / \lambda_1)$$

$$I = c \cdot \sigma \cdot T(E_{kin})$$

c – концентрация элемента;
 σ – сечение фотоионизации электрона;
 $T(E_{kin})$ – параметр, зависящий от энергии фотоэлектрона, угла вылета, аппаратурного Фактора и т.д.

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{I_1}{I_2} \cdot \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \cdot A$$

РФЭС: химический состав поверхности твердых тел



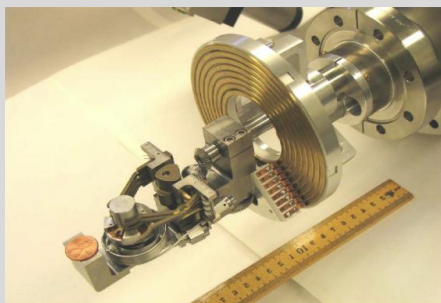
Челнок "Буран"



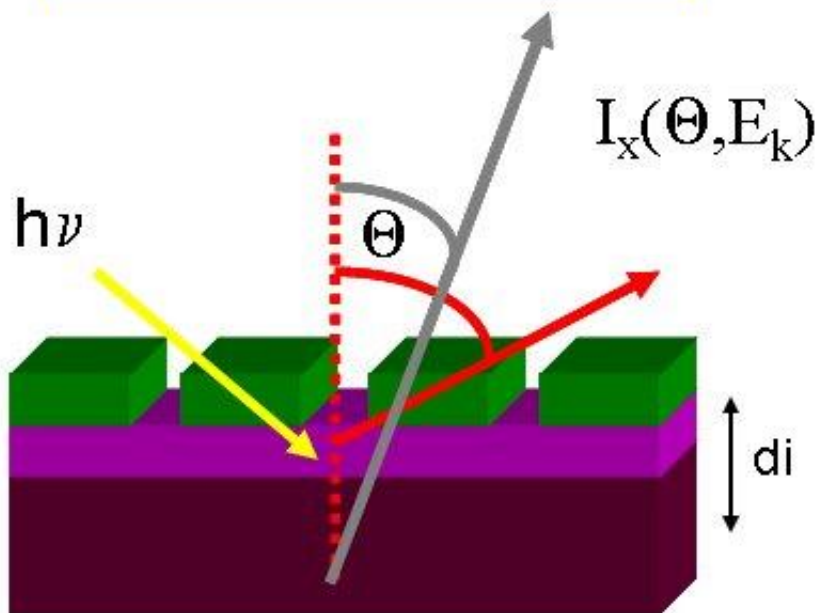
Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция (РФЭС+РФД):

- химический состав поверхности;
- профиль концентрации элементов по глубине
- валентность элементов на поверхности;
- структура поверхности;
- электронная структура валентной зоны

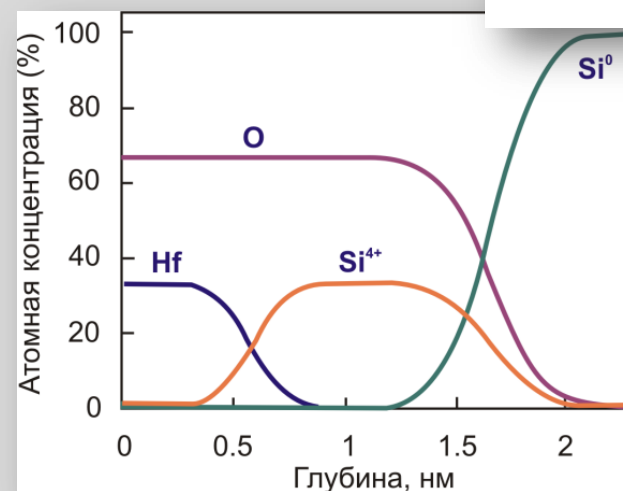
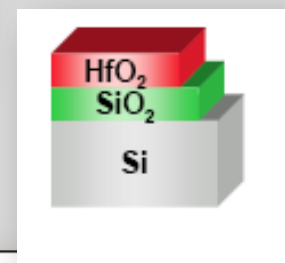
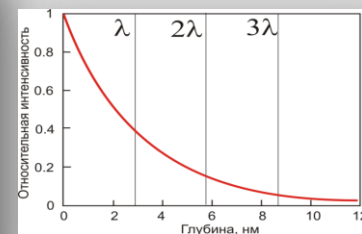
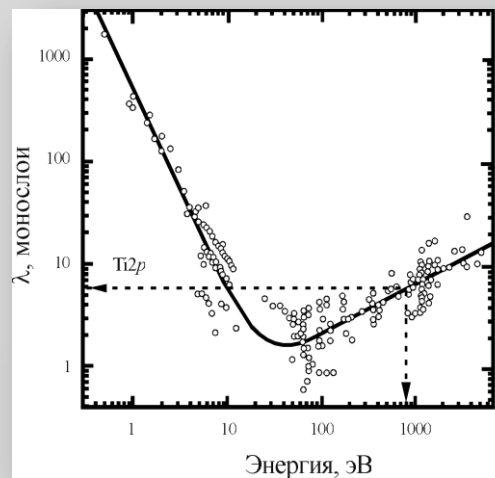
Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением



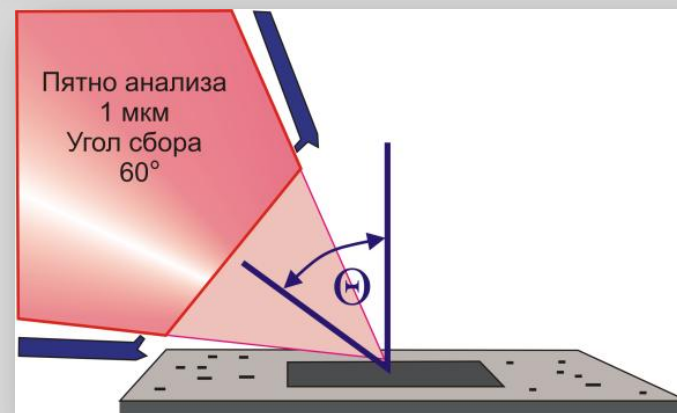
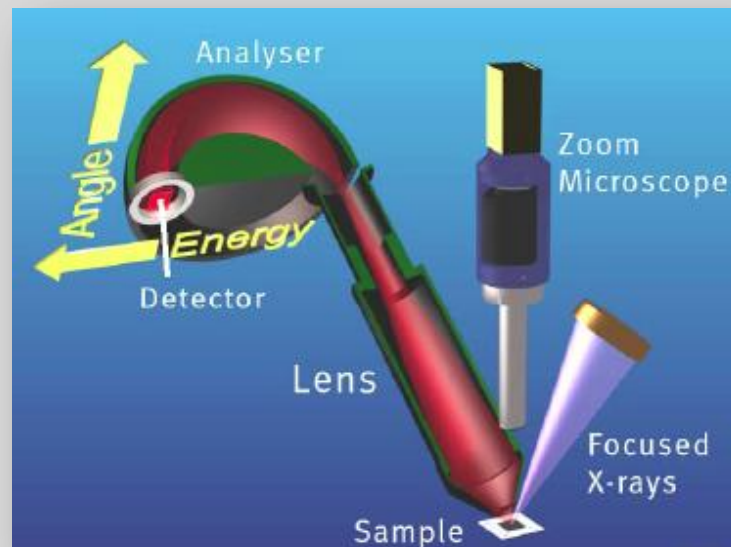
Principle of ARXPS



effective information depth di
varies with polar angle θ



Спектрометр Theta Probe (Thermo Scientific)





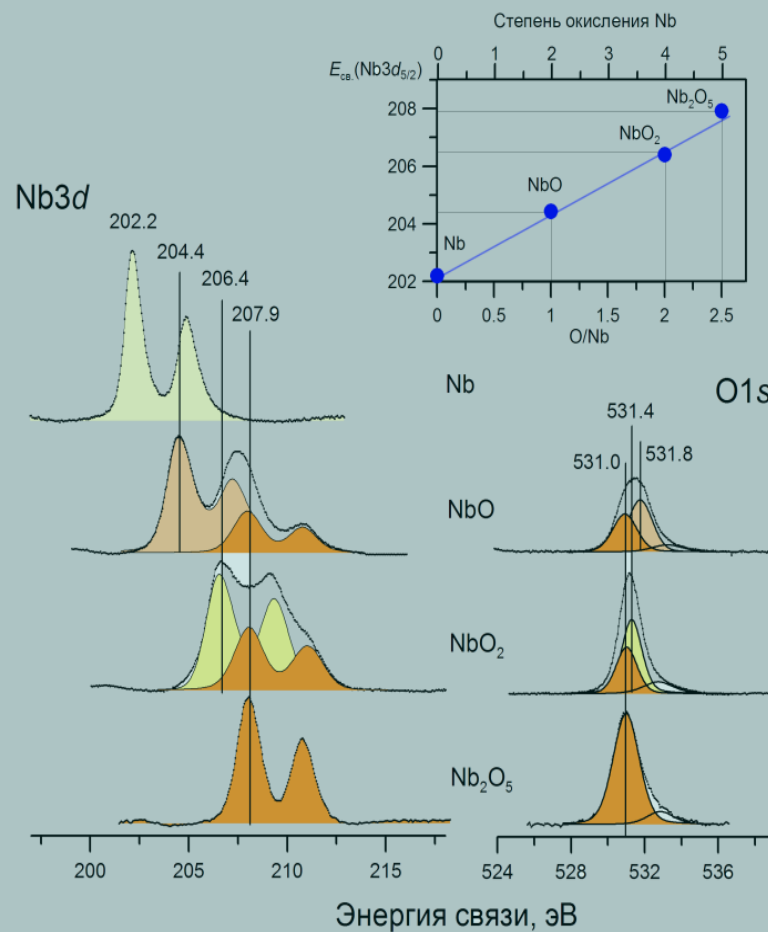
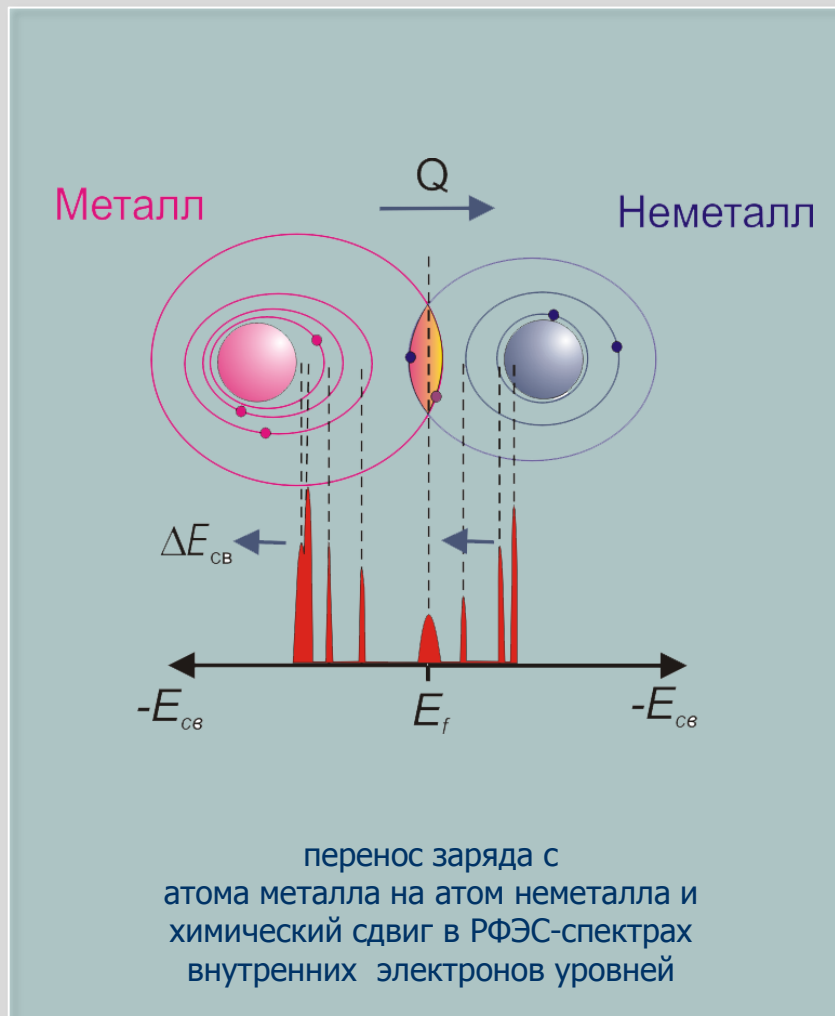
Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция (РФЭС+РФД):

- химический состав поверхности;
- профиль концентрации элементов по глубине
- валентность элементов на поверхности;
- электронная структура валентной зоны
- структура поверхности;

Химический сдвиг внутренних электронных уровней РФЭС :



возможность определения валентного состояния элементов в химических соединениях



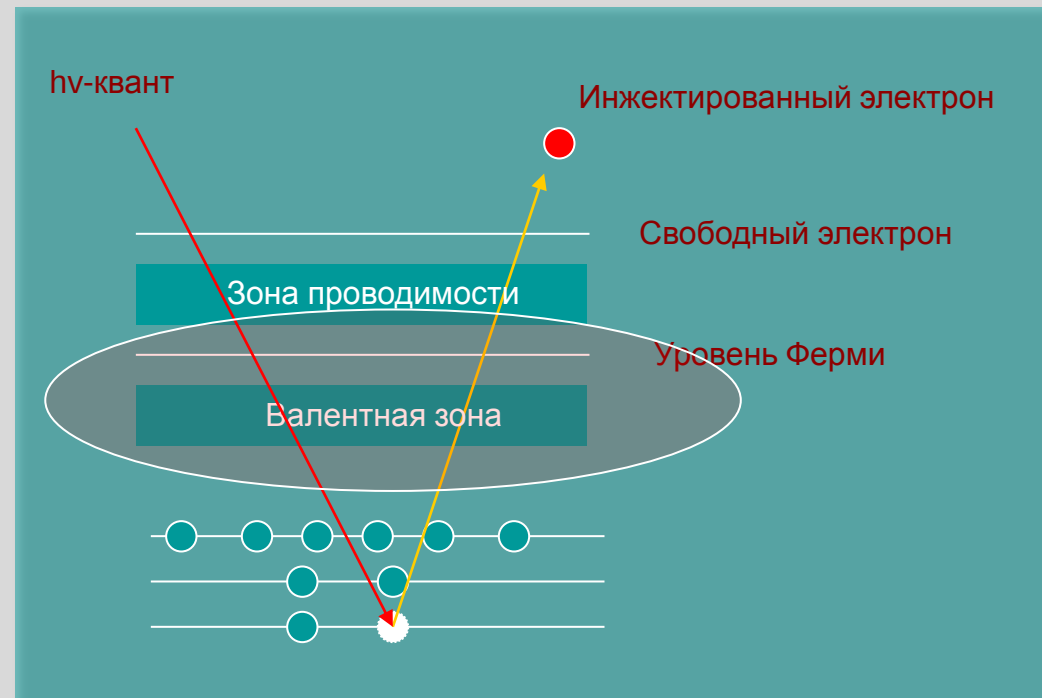
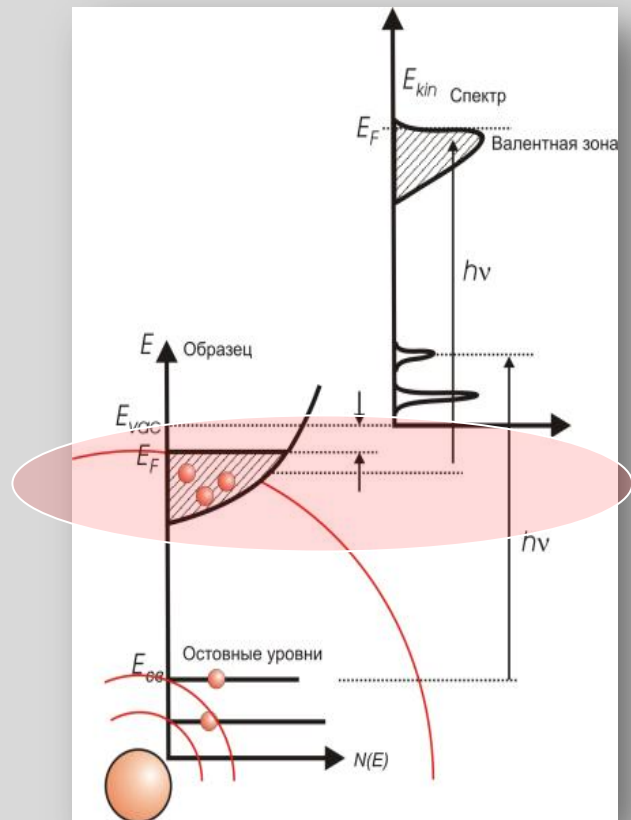
РФЭС Nb3d ниобия и O1s кислорода **системы Nb-O:** металлический ниобий, частично окисленные до высшего оксида поверхности NbO, NbO₂ и Nb₂O₅.



Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция (РФЭС+РФД):

- химический состав поверхности;
- профиль концентрации элементов по глубине
- валентность элементов на поверхности;
- электронная структура валентной зоны
- структура поверхности;

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия электронной структуры валентной зоны



Фундаментальные исследования электронной структуры TiX_2 (X: S, Se, Te)

PRL 99, 146403 (2007) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 5 OCTOBER 2007

Evidence for an Excitonic Insulator Phase in 1T-TiSe_2

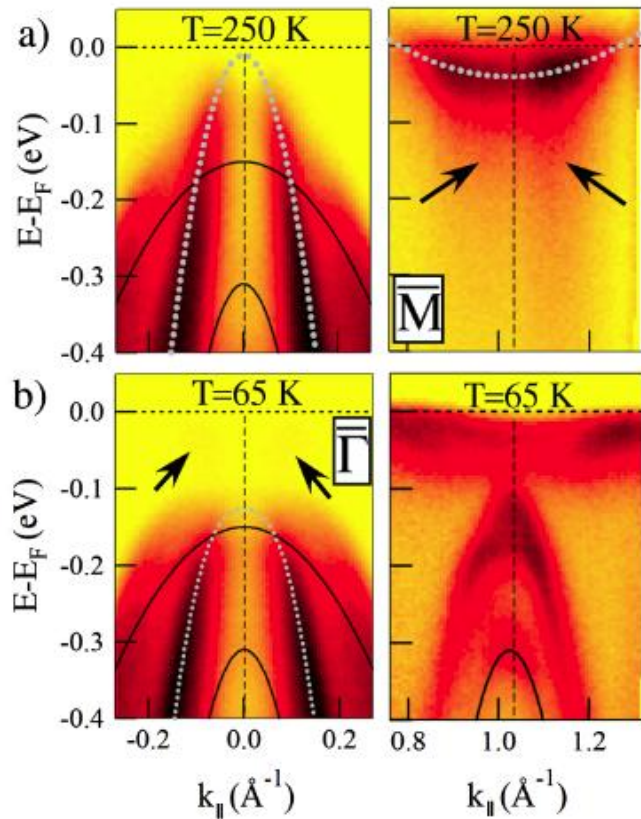
H. Cercellier,^{*} C. Monney, F. Clerc, C. Battaglia, L. Despont, M. G. Garnier, H. Beck, and P. Aebi
Institut de Physique, Université de Neuchâtel, CH-2000 Neuchâtel, Switzerland

L. Patthey

Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen, Switzerland

H. Berger and L. Forró

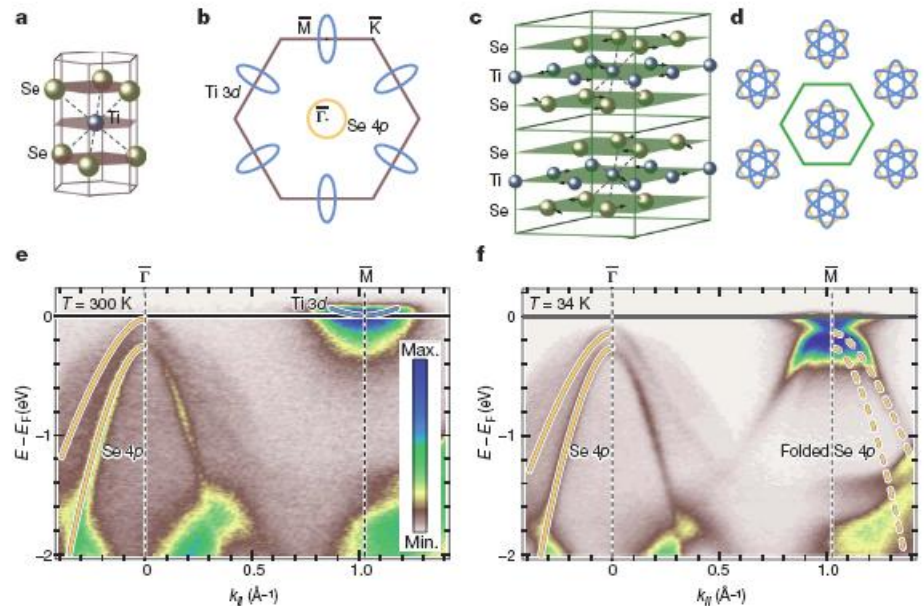
Institut de Physique de la Matière Complexe, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland
(Received 30 March 2007; published 4 October 2007)



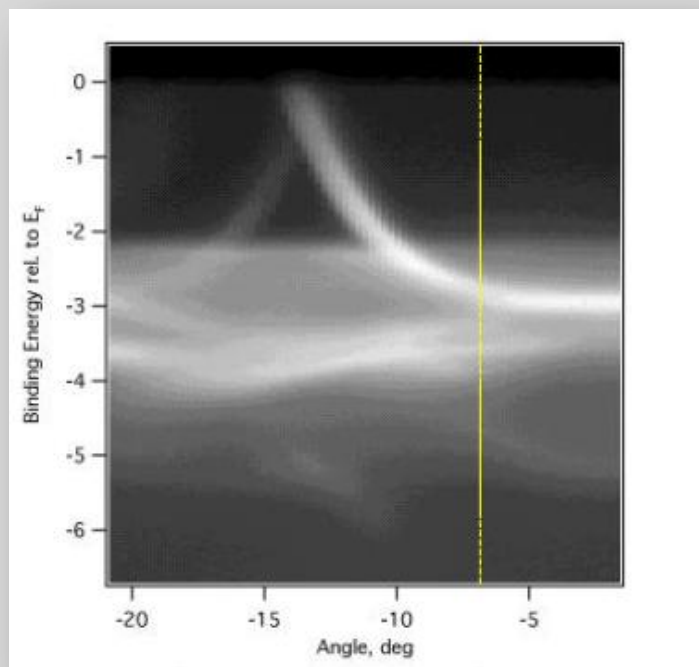
NATURE, VOL 471, 24 MARCH 2011

Collapse of long-range charge order tracked by time-resolved photoemission at high momenta

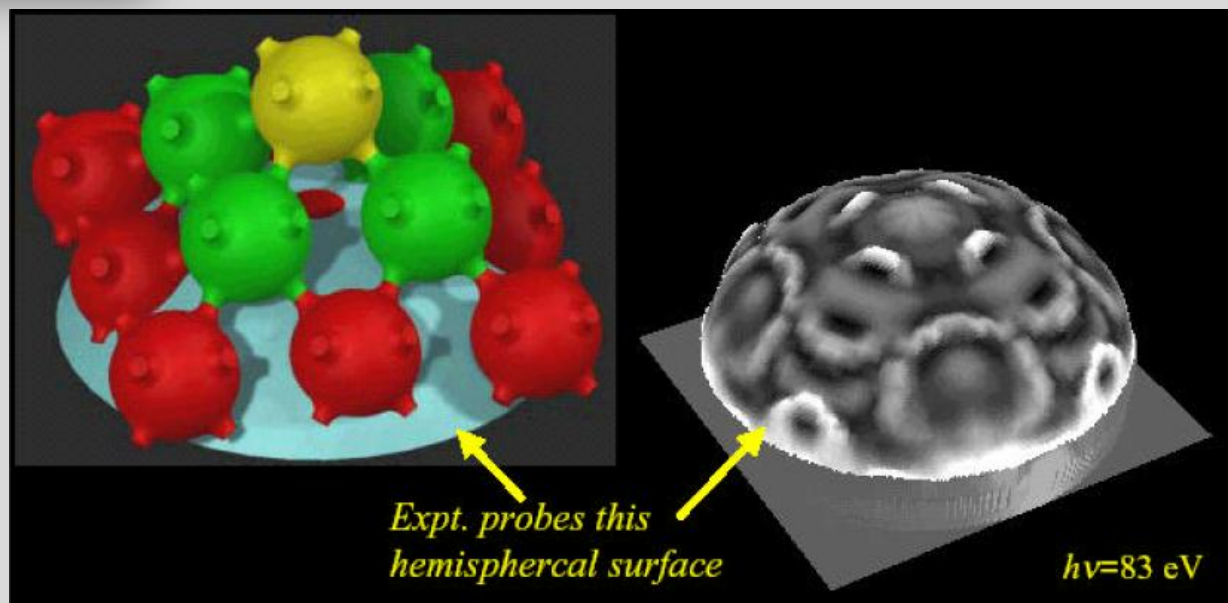
Timm Rohwer^{1*}, Stefan Hellmann^{1*}, Martin Wiesenmayer¹, Christian Sohrt¹, Ankatrin Stange¹, Bartosz Slomski¹, Adra Carr², Yanwei Liu^{3,4}, Luis Mijang Avila³, Matthias Kalläne¹, Stefan Mathias^{2,6}, Lutz Kipp¹, Kai Rossnagel¹ & Michael Bauer¹



ARPES-эксперименты предсказывают существование фазы экситонного изолятора в 1T-TiSe_2 и ее ведущей роли при переходе в ВЗП-состояние ($T < 200\text{ K}$).



Пример построения карты дисперсии зон и поверхности Ферми Cu(100) на основе данных РФЭС УР



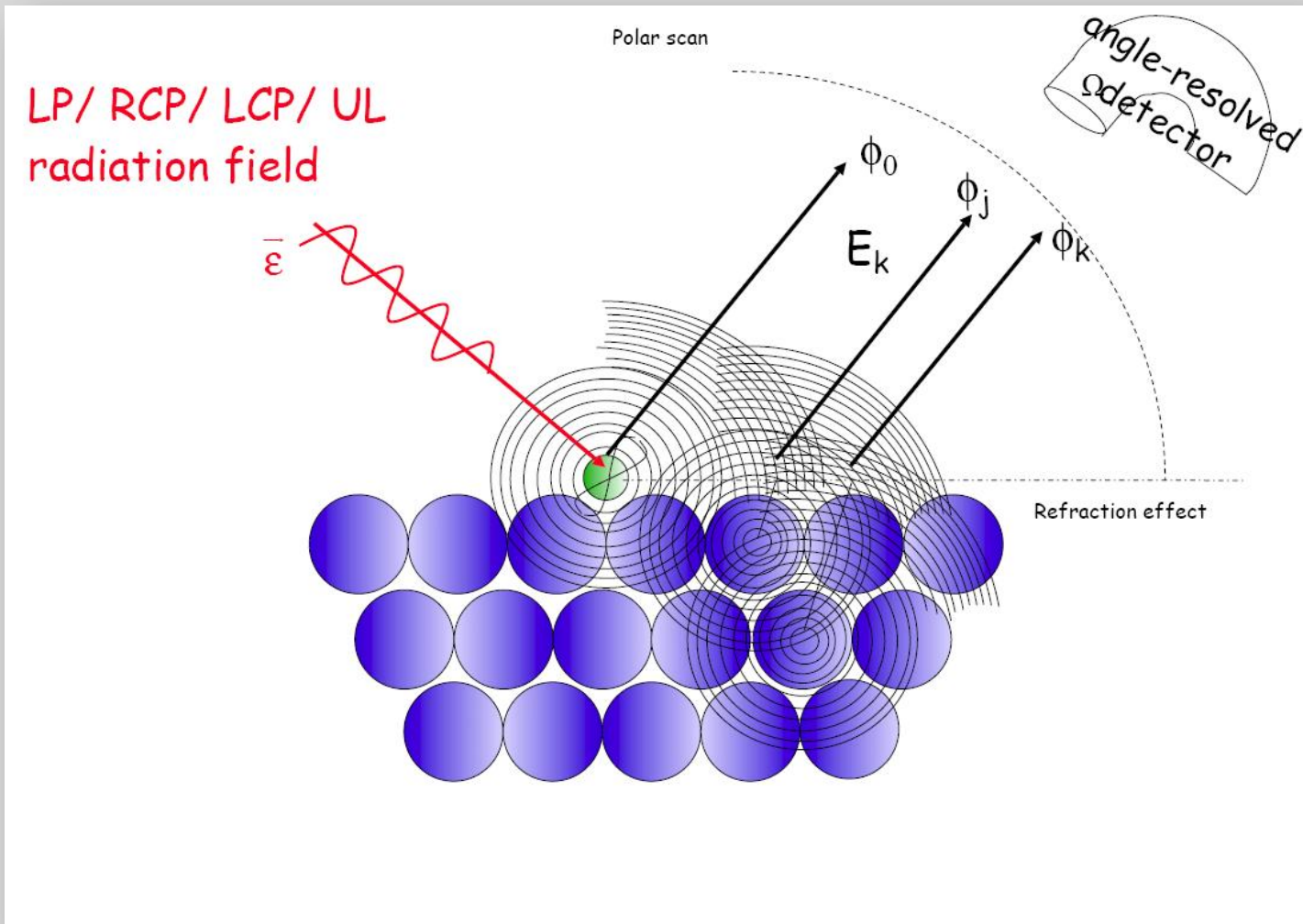


Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция (РФЭС+РФД):

- химический состав поверхности;
- профиль концентрации элементов по глубине
- валентность элементов на поверхности;
- электронная структура валентной зоны
- структура поверхности;

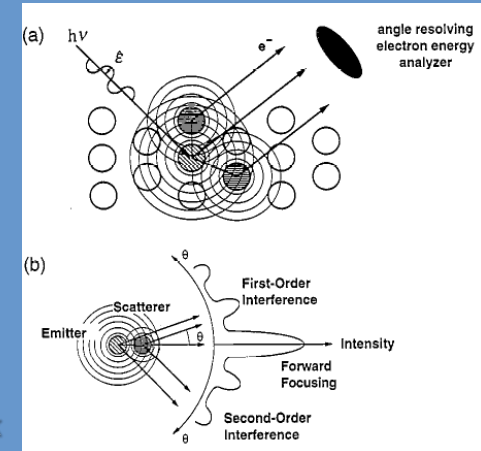
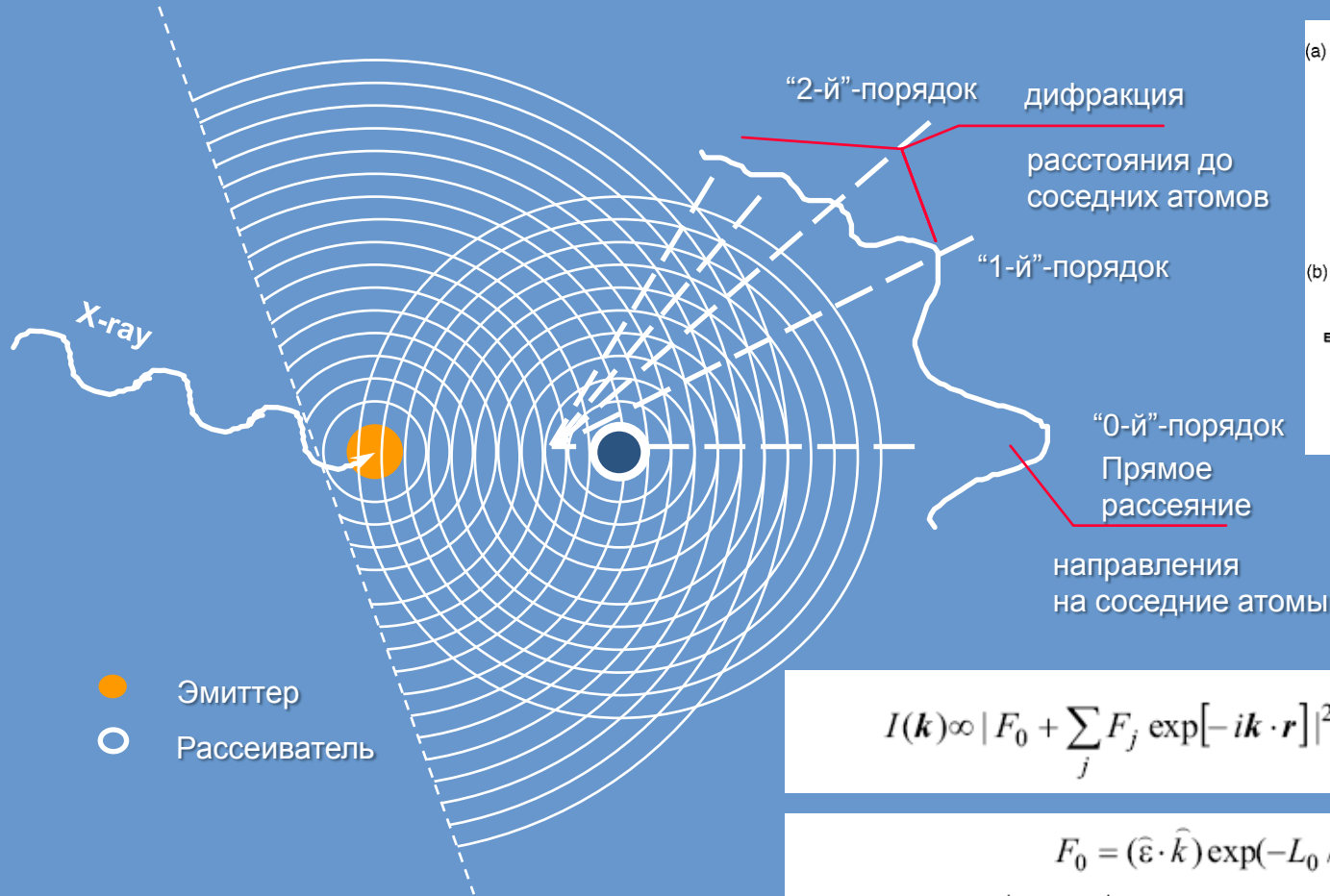
Структурная информация о поверхности

Рентгеновская Фотоэлектронная Дифракция (РФД) за счет рассеяния фотоэлектронов на соседних атомах.





Рентгеновская Фотоэлектронная Дифракция



$$I(\mathbf{k}) \propto |F_0 + \sum_j F_j \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j]|^2,$$

где

$$F_0 = (\hat{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \exp(-L_0 / 2\Lambda_e),$$

$$F_j = (\hat{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}}_j / r_j) |f_j(\theta_j)| W_j \exp(-L_j / 2\Lambda_e) \exp[i\varphi_j(\theta_j)] \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j].$$

$$I(\mathbf{k}) \propto |F_0|^2 + \sum_j [F_0^* F_j \exp\{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j\} + F_0 F_j^* \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j\}] + \sum_j \sum_k [F_j^* F_k \exp\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)\} + F_j F_k^* \exp\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j)\}].$$

Вся структурная информация об анализируемом кластере заключена в слагаемых, содержащих фазовые множители типа $\exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)\}$ или $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j)$, которые определяются взаимным расположением атомов эмиттера и рассеивателей

РФД: рассеяние фотоэлектронов на соседних атомах. Структурная информация о поверхности

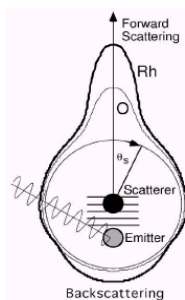
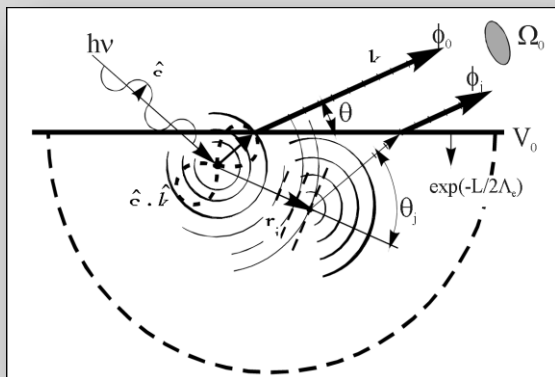
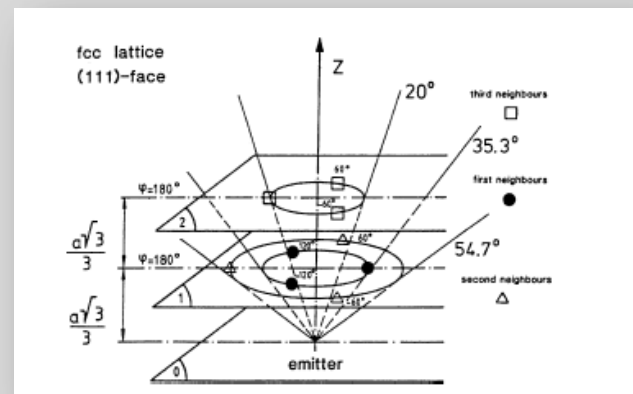
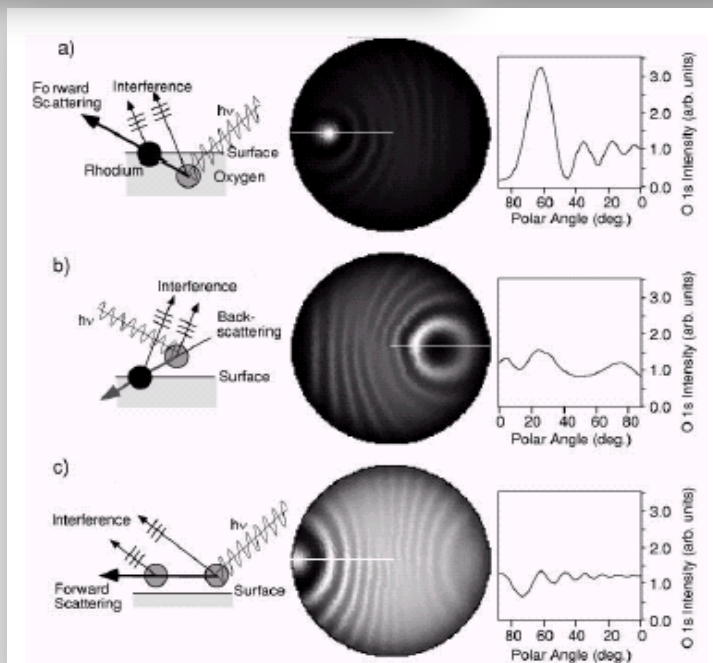
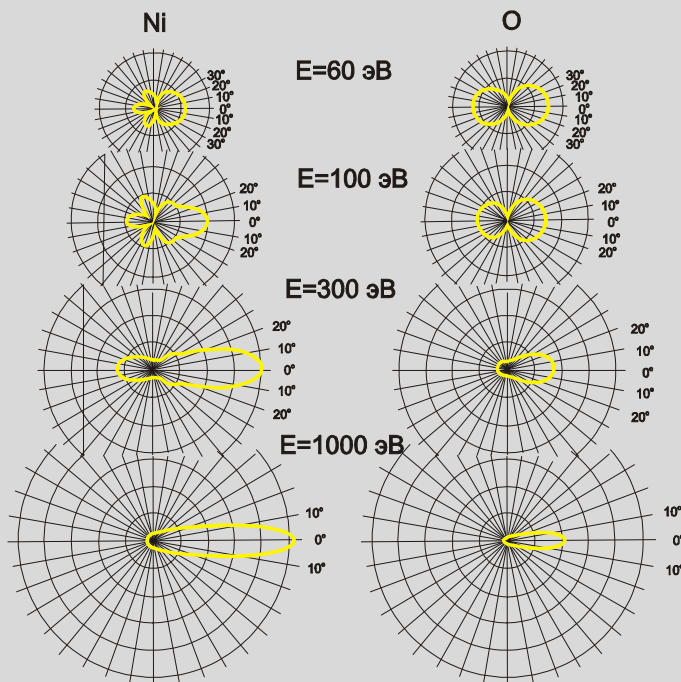


FIG. 1. Polar diagram of the scattering amplitude of an electron plane wave of 723 eV kinetic energy scattering off a Rh atom (thick line) and an oxygen atom (thin line). The circle represents zero amplitude.



Зависимость РФД-картин от кинетической энергии фотоэлектронов

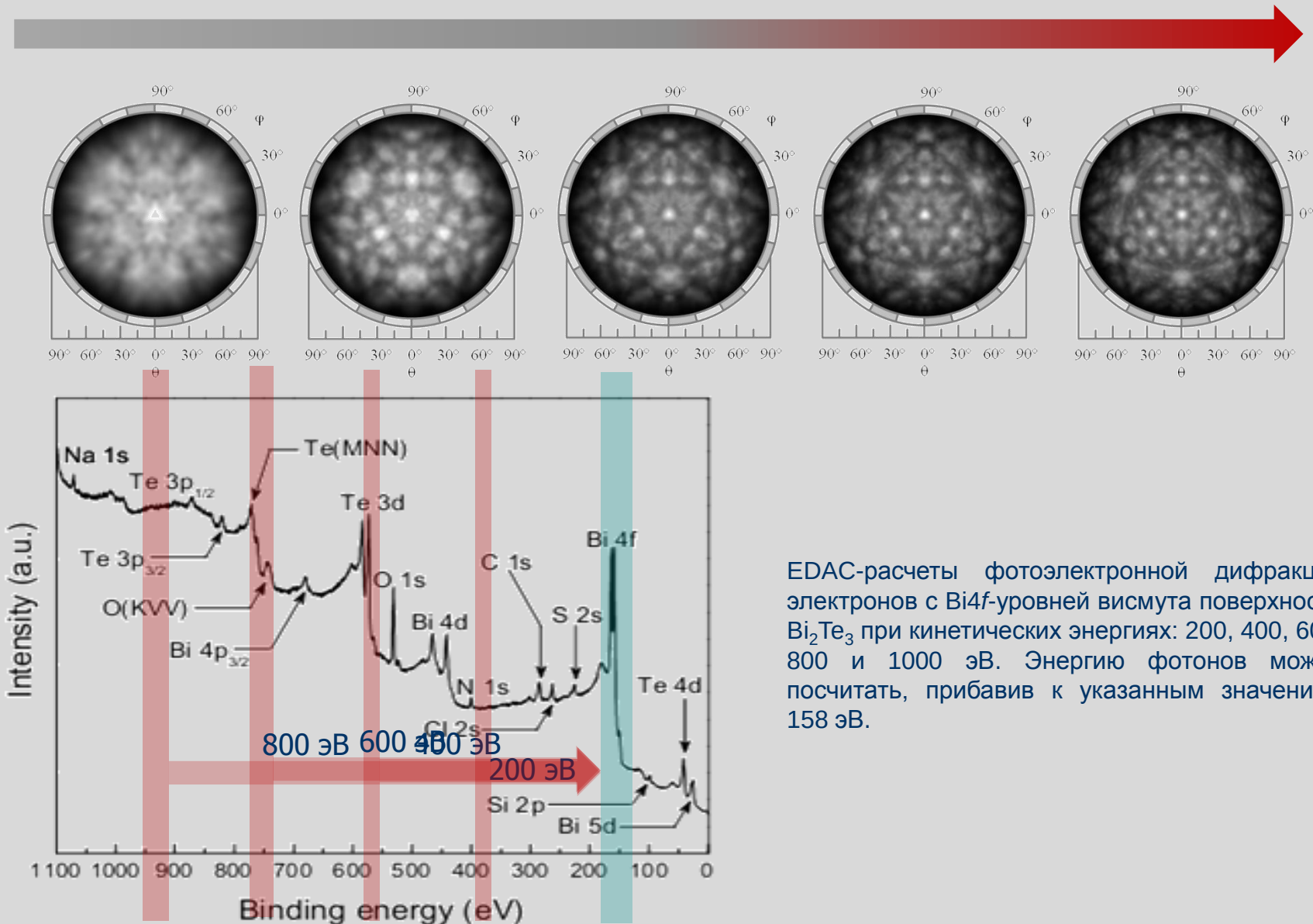
200 эВ

400 эВ

600 эВ

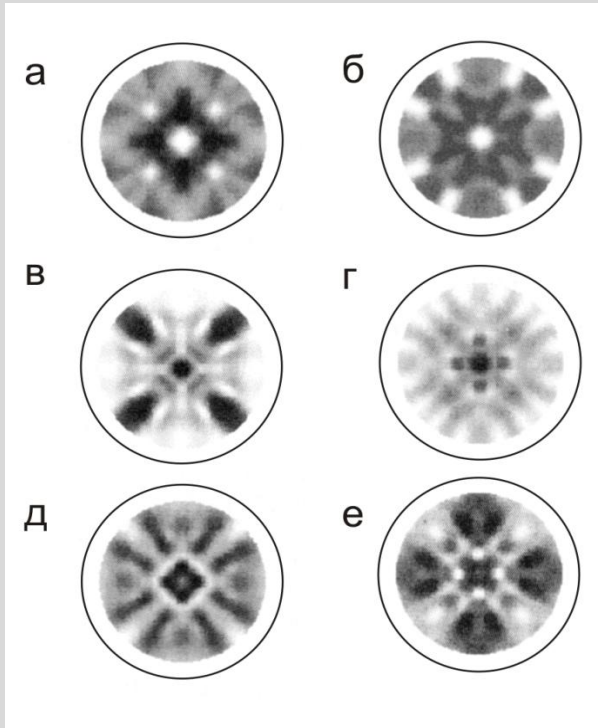
800 эВ

1000 эВ



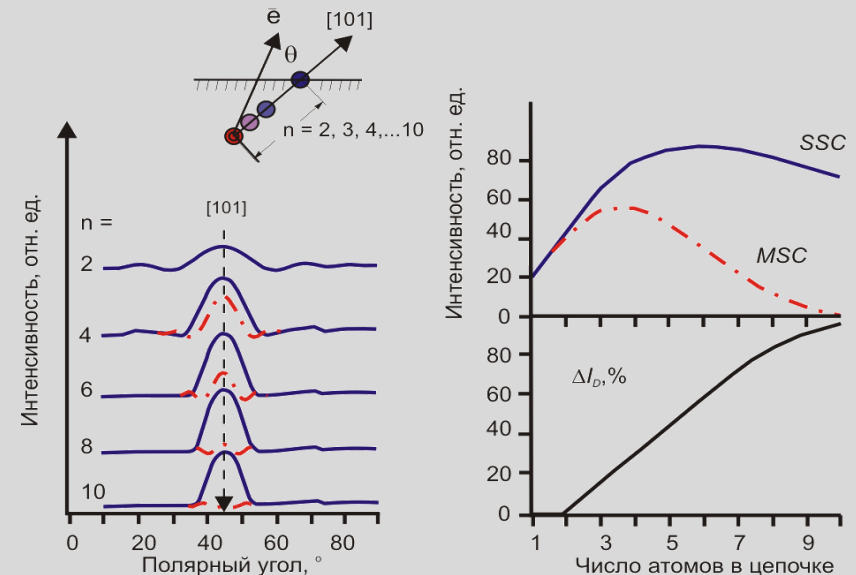
EDAC-расчеты фотоэлектронной дифракции электронов с Bi4f-уровней висмута поверхности Bi₂Te₃ при кинетических энергиях: 200, 400, 600, 800 и 1000 эВ. Энергию фотонов можно посчитать, прибавив к указанным значениям 158 эВ.

К настоящему времени разработан ряд реалистических квантово-механических моделей, описывающих рассеяние фотоэлектронов сферическими волнами, и учитывающих **эффекты многократного рассеяния** - т.н. методы рассеяния сферических волн (SSC-SW, MSC-SW). Приближение s -фотоэмиссии также оказывается неудовлетворительным. Ограничение этого подхода для интерпретации фотоэлектронной- и оже-дифракции продемонстрировано циклом основополагающих экспериментальных и теоретических работ, в частности, профессора Ч.Федлей. Было установлено, что характер конечного состояния эмиттированного фотоэлектрона (тип волны - s , p , d , f , g или h) оказывает решающее влияние на дифракционные эффекты, особенно при низких кинетических энергиях $E_{кин} < 100$ эВ, где чувствительность метода к тонким структурным эффектам возрастает.



Рассчитанные 2π -проекции дифракции электронов ($E_{кин}=60$ эВ) на поверхности Cu(001) в приближении однократного рассеяния сферических волн (SSC SW). При низких кинетических энергиях тип волны электрона (a - s -тип, b - p , $в$ - d , $г$ - f , $д$ - g , $е$ - h) сильно влияет на вид ифракционной 2π -картины

Сопоставление результатов расчетов однократного и многократного рассеяния на примере дифракции фотоэлектронов Al $2s$ ($E_{кин}=1336,0$ эВ) на линейной Al[101]-цепочке атомов алюминия. В качестве эмиттера выбран крайний Al-атом (отмечен на вставке)





РФД-эксперимент

ESCALAB MK II

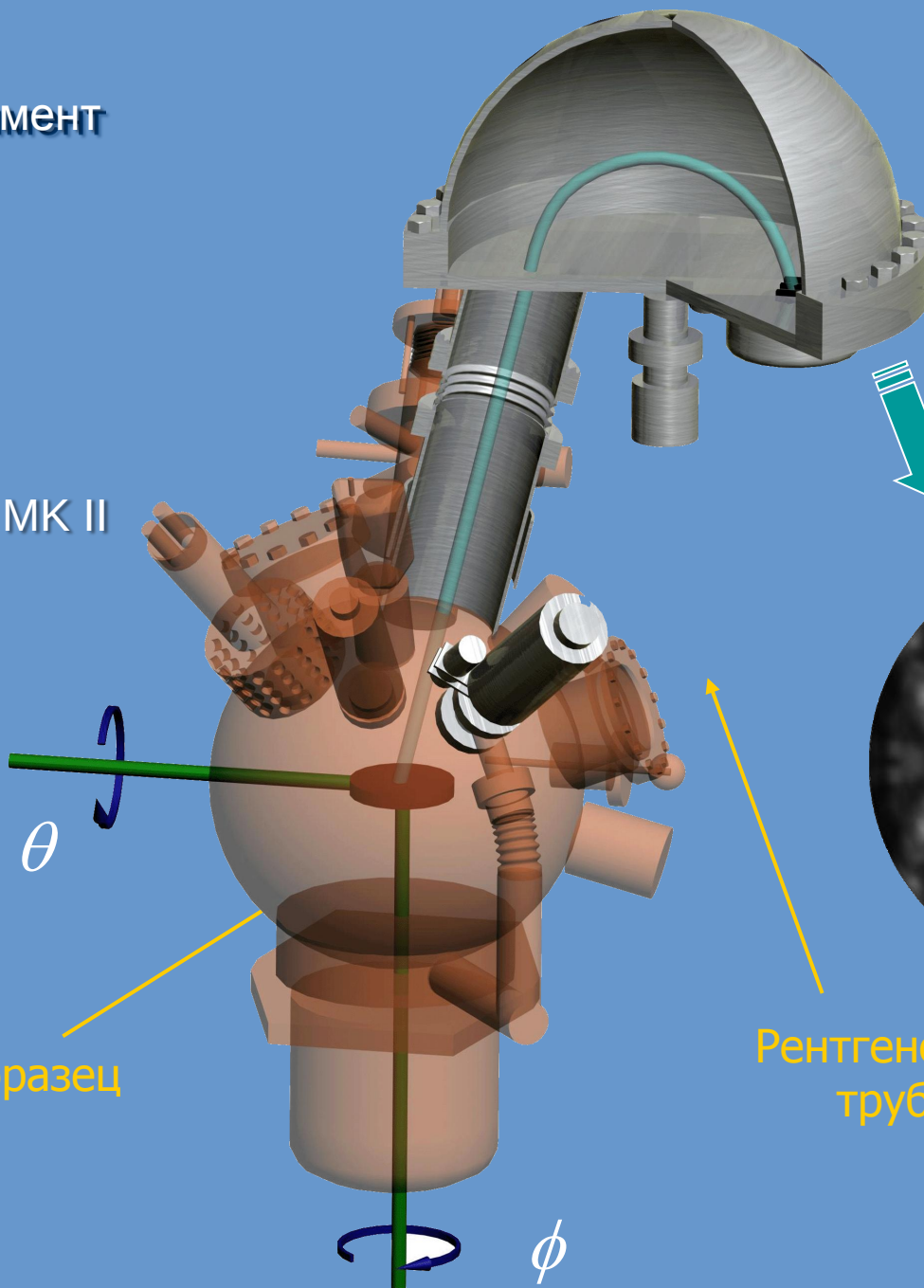
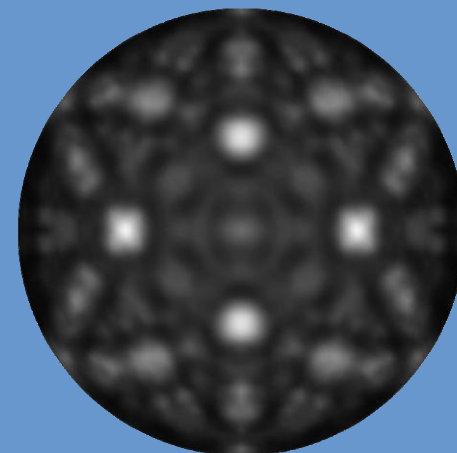
образец

θ

ϕ

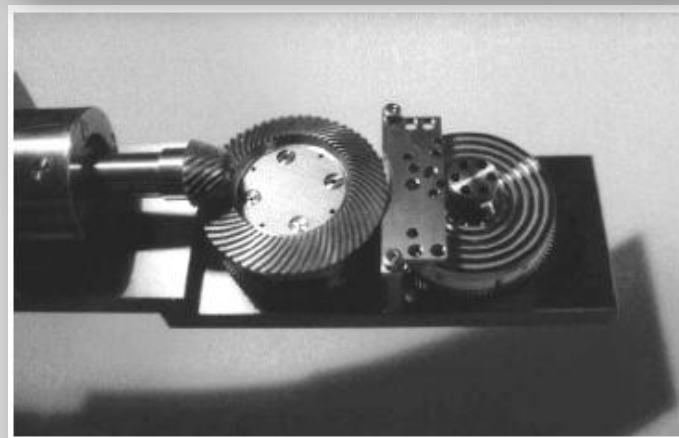
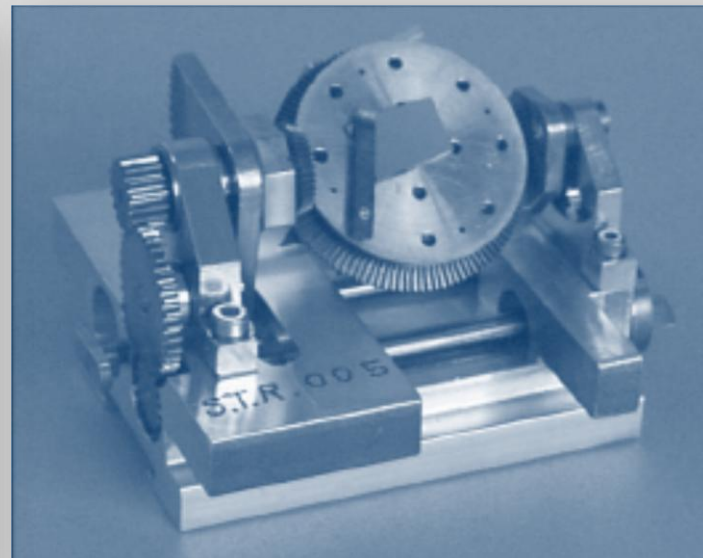
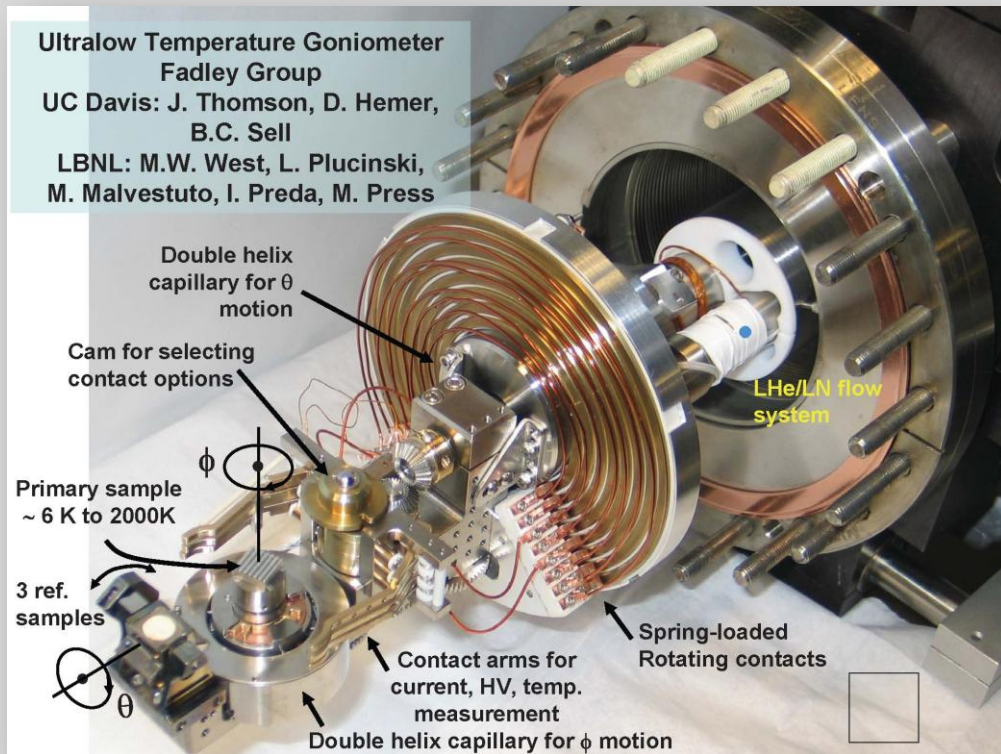
Рентгеновская
трубка

РФД Nb3d

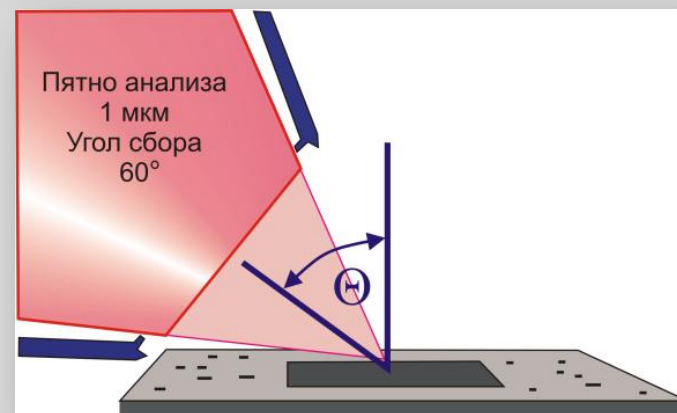
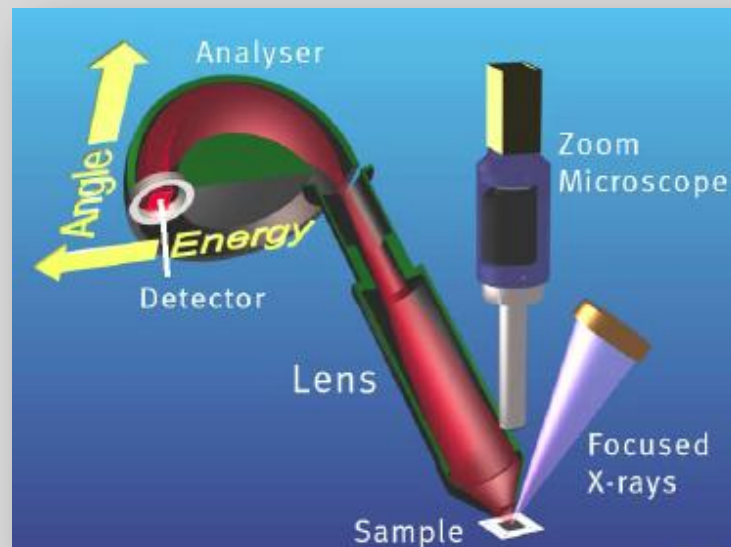




Держатели образцов, используемые для РФЭС УР- и РФД-экспериментов: организуется вращение образцов по азимутальному (ϕ) и полярному (θ) углам



Спектрометр Theta Probe (Thermo Scientific)





РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ

Эксперимент

преимущества :

- время эксперимента
- подготовка образцов

**Лабораторный
спектрометр**

**Синхротронное
Х-излучение**

преимущества:

- высокая интенсивность
- энергетическое разрешение
- вариация энергии
- поляризация фотонов

**РФД со
сканированием
по углу**

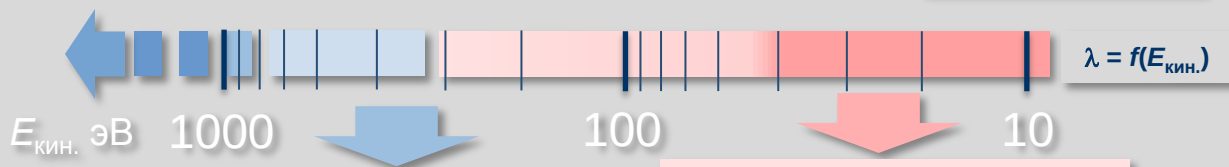
информация:

- геометрия рассеивающего кластера

**РФД со
сканированием
по энергии**

информация:

- межатомные расстояния
в рассеивающем кластере



- работает модель прямого рассеивания “in forward direction” и s—приближение;
- для интерпретации часто не требуется проведение расчетов;
- жесткое РФД при $h\nu > 5 \text{ кэВ}$

- прямое и обратное рассеивание электронов;
- влияние орбитального момента;
- для интерпретации требуются количественные расчеты;
- чувствительность к поверхности.

Угловые зависимости фотоэмиссии $I(\theta)$, $I(\phi)$, полные 2π -картины РФД

- поверхность монокристаллов (симметрия, релаксационное сжатие или растяжение поверхностных слоев и т.д.);
- РФД с разрешением химических состояний элементов;
- структура и позиции адсорбата на поверхности;
- рост эпитаксиальных слоев на поверхности;
- структура слоев под поверхностью, гетероструктуры;
- магнитная структура ближнего порядка.

РФД-голография

**3D-образ
структуры
рассеивающего
кластера**

Моделирование

анализ РФД-картин в приближении “in forward direction” в случае высоких $E_{\text{кин.}}$ и простых систем

**РФД со сканированием по
энергии**

моделирование осциллирующей функции $\chi(E) = I(E) - I_0(E) / I_0(E)$ в приближениях одно- или многократного рассеяния.

РФД со сканированием по углу

моделирование рассеивающего кластера в приближении одно или многократного рассеяния сферических волн (SSC-SW, MSC-SW)

суперпозиция модельных РФД-картин от нескольких неэквивалентных рассеивающих кластеров, наилучшим образом описывающих эксперимент.

R-фактор достоверности:

$$R = \sum (|I_{\text{теор.}} - I_{\text{эсп.}}|) / \sum I_{\text{эсп.}}$$

MSCD

Multiple Scattering Calculation of Diffraction

EDAC

Electron Diffraction in Atomic Clusters



Comparison between Calculated and Measured Photoelectron Diffraction Patterns for Cu (001)

G.P. Cousland^a, A.E. Smith^a, J.Riley^b, S.Homolya^c, A. Stampfl^d, J. King-Lacroix^d

^a School of Physics, Monash University, Clayton, Victoria 3800.

^b Department of Physics, La Trobe University, Bundoora, Victoria 3086.

^c CSIRO Division of Materials and Manufacturing Technology, Clayton South, Victoria 3169.

^d Bragg Institute, Australian Nuclear Science and Technology Organisation, Menai, NSW 2234.

Эксперимент

тороидальный электронный спектрометр
Bessy II

Моделирование

Electron Diffraction in Atomic Clusters
(EDAC)

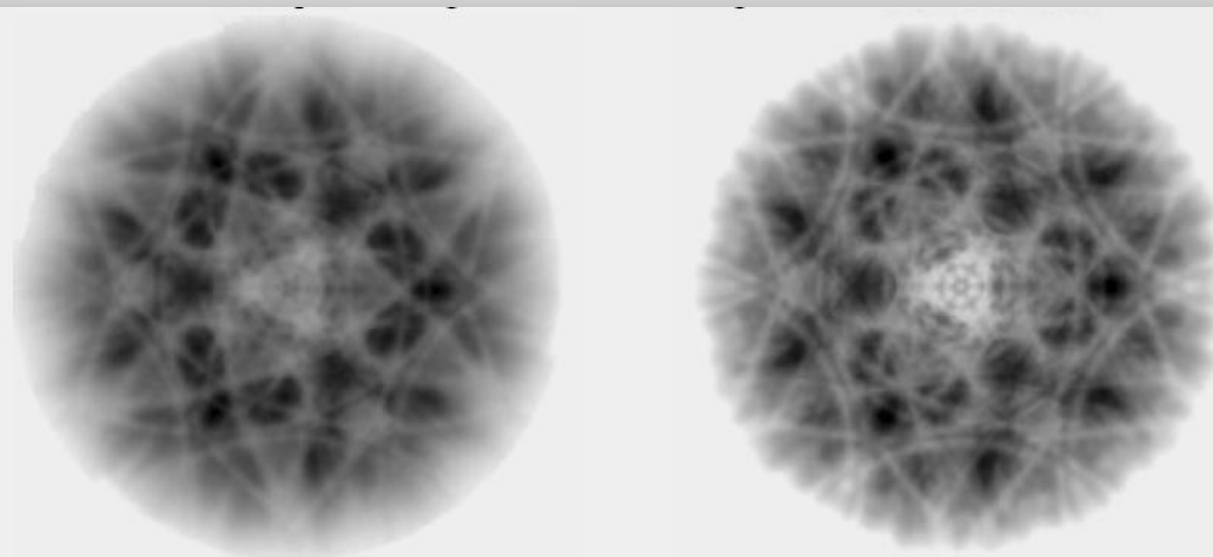
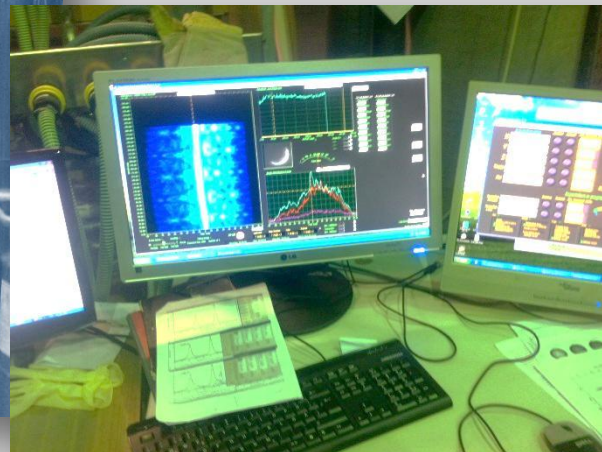
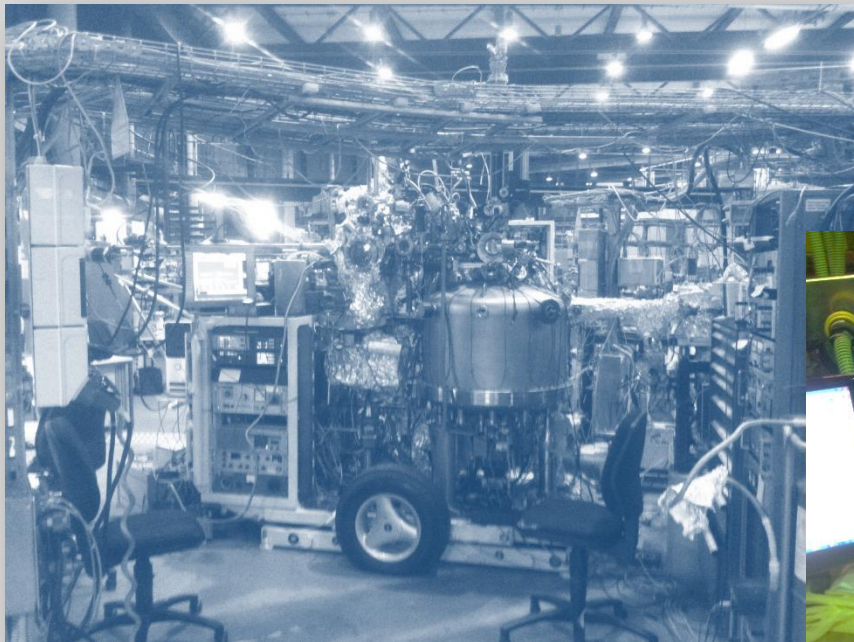
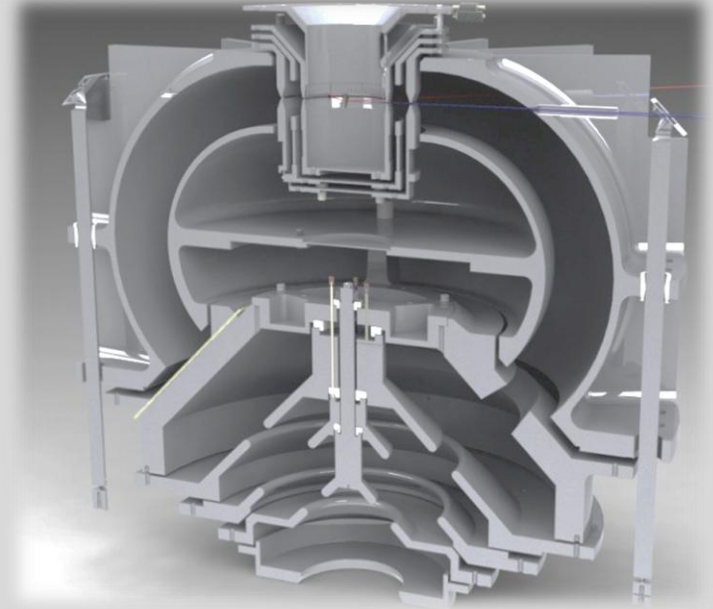
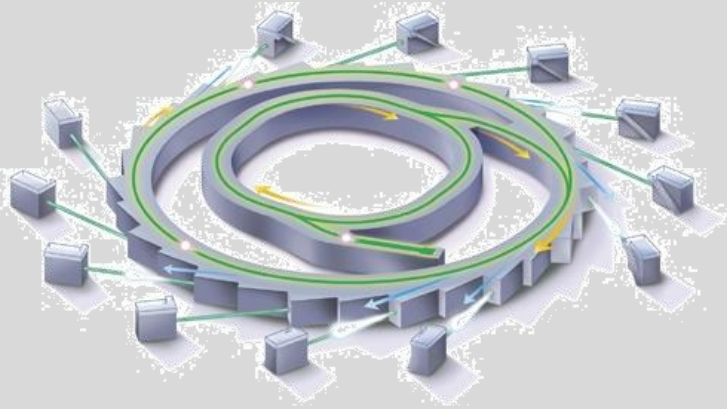


Fig 1 Stereographically projected image of Cu (111) data for an incident photon energy of 600eV for experimental (left) and simulated (right) diffractograms. Note the bright peaks indicating forward focusing along low index axes and Kikuchi bands indicating Bragg diffraction of the photoelectron wavefunction from planes of atoms.

Линия BESSY II со специализированным ТОРОИДАЛЬНЫМ анализатором для изучения фотоэлектронной дифракции электронов.

Исследование атомной структуры поверхности топологических изоляторов – слоистых кристаллов Bi_2X_3 (X:Se,Te) и $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$.



Photoelectron Holography: Analogy to Optical Holography

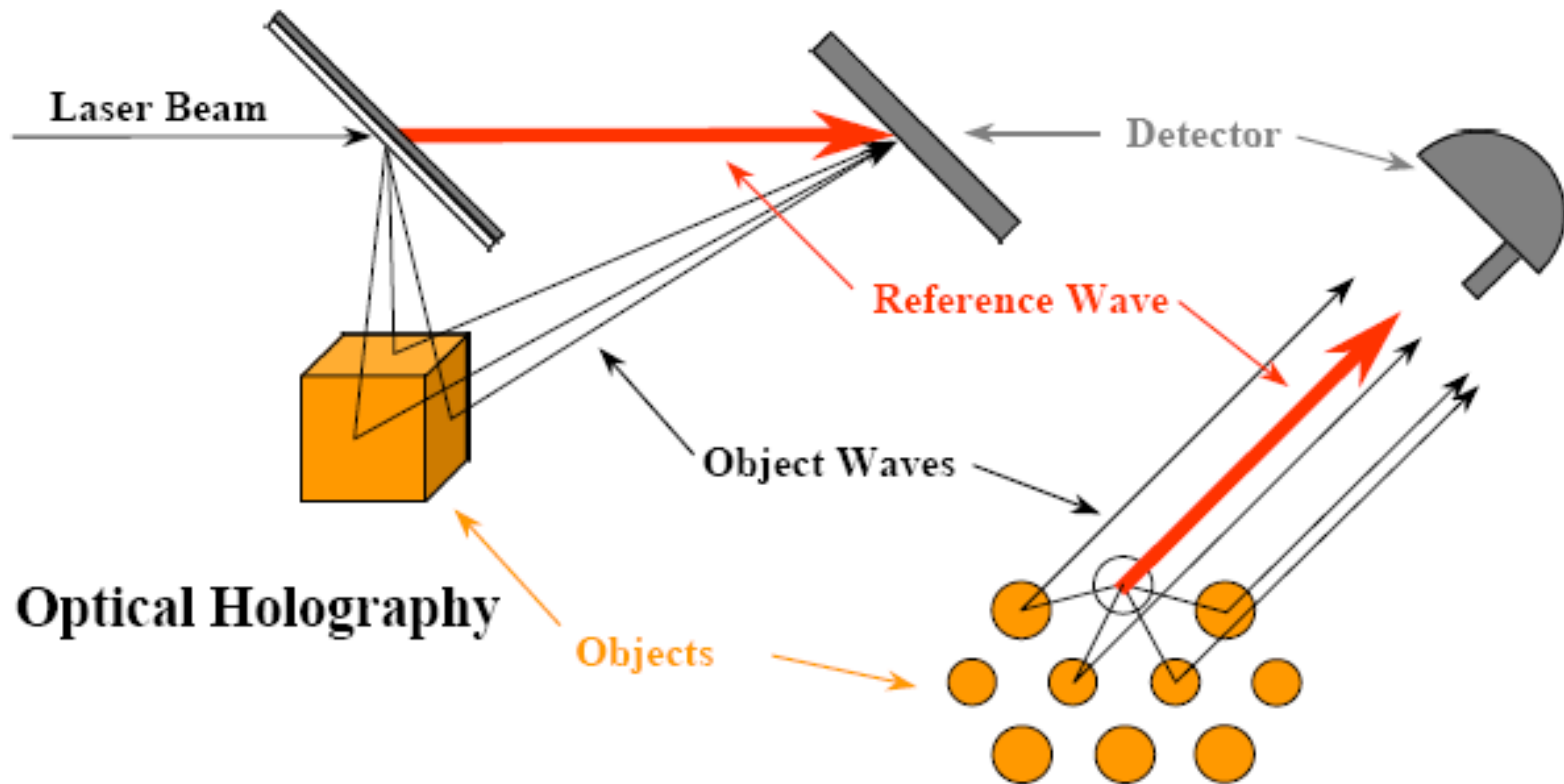
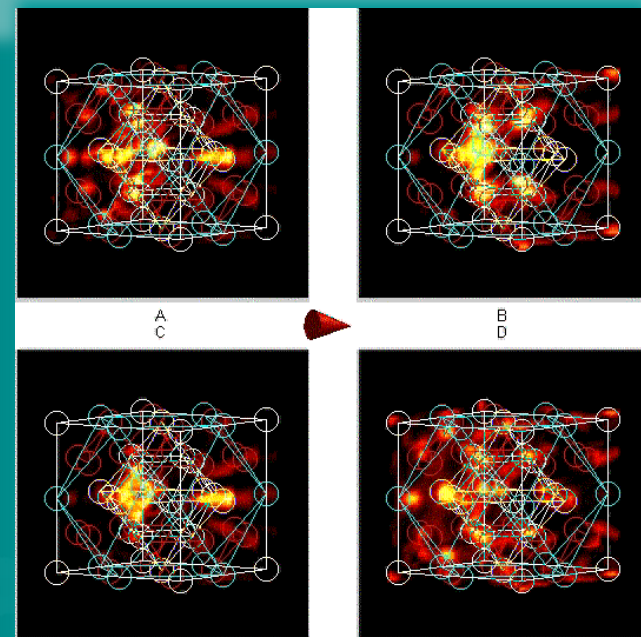
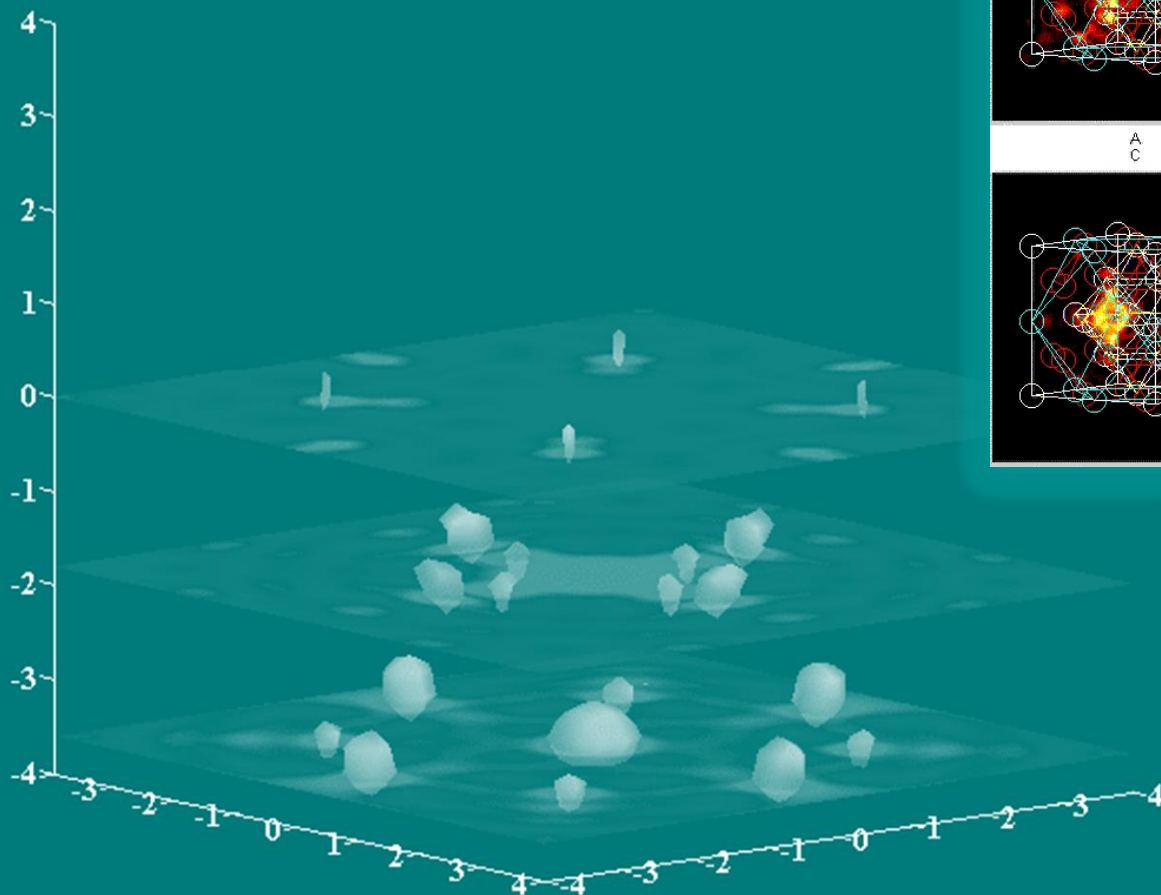


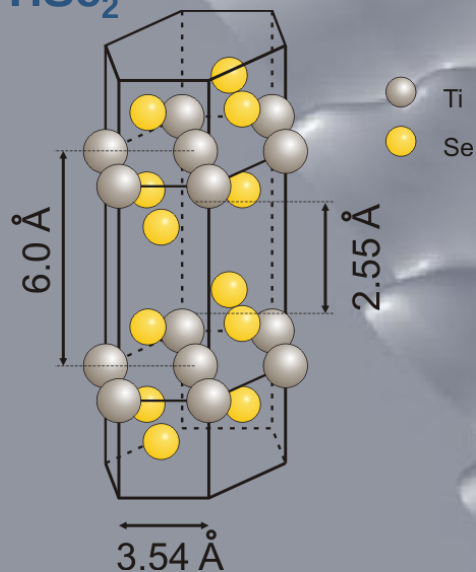
Photo-electron Holography

Трехмерное изображение поверхности $\text{Cu}(001)$, полученное методом дифференциальной фотоэлектронной голографии



РЕКОНСТРУКЦИЯ 3D-АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ 1T-TiSe₂ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ ГОЛОГРАФИИ

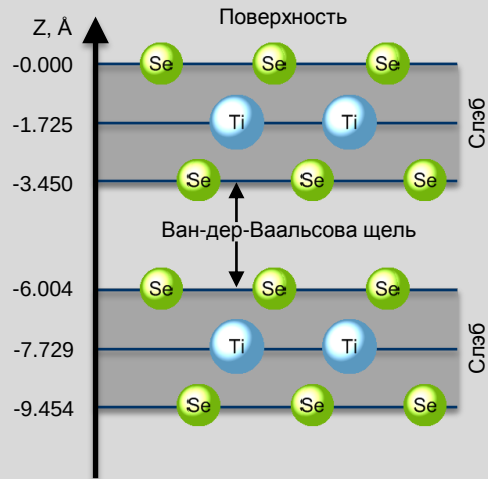
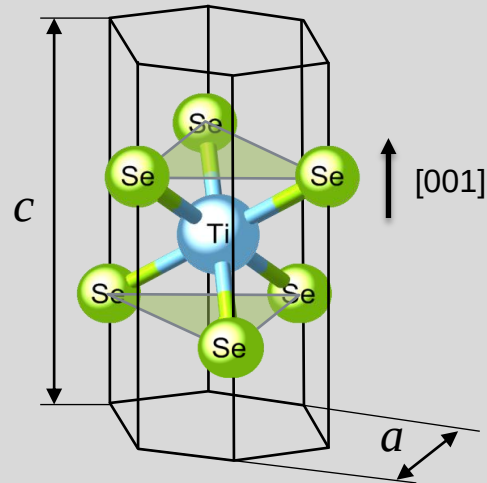
TiSe₂



М.В.Кузнецов, И.И.Огородников, А.С.Ворох, А.Н.Титов

Мотивация исследований

Изучение атомной и электронной структуры поверхности 1T-TiSe₂



Структура TiSe₂

PRL 99, 146403 (2007)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
5 OCTOBER 2007

Evidence for an Excitonic Insulator Phase in 1T-TiSe₂

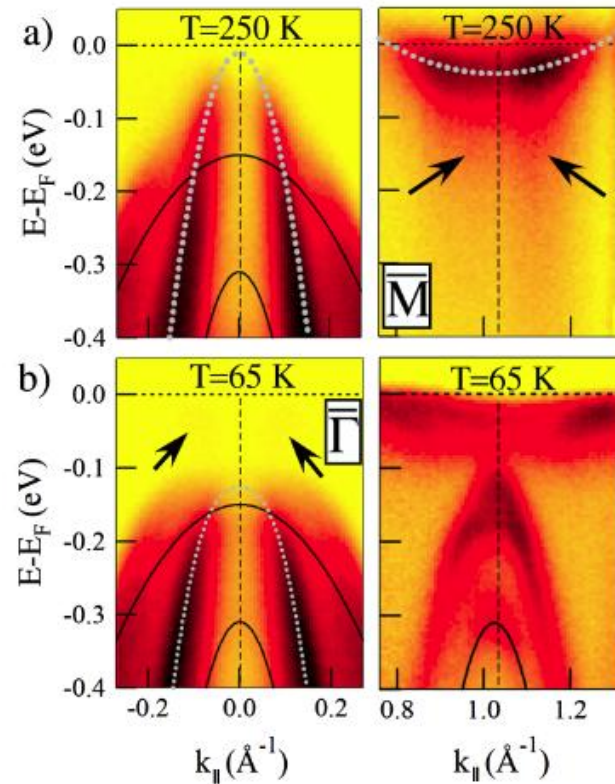
H. Cercellier,* C. Monney, F. Clerc, C. Battaglia, L. Despont, M. G. Garnier, H. Beck, and P. Aebi
Institut de Physique, Université de Neuchâtel, CH-2000 Neuchâtel, Switzerland

L. Patthey

Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen, Switzerland

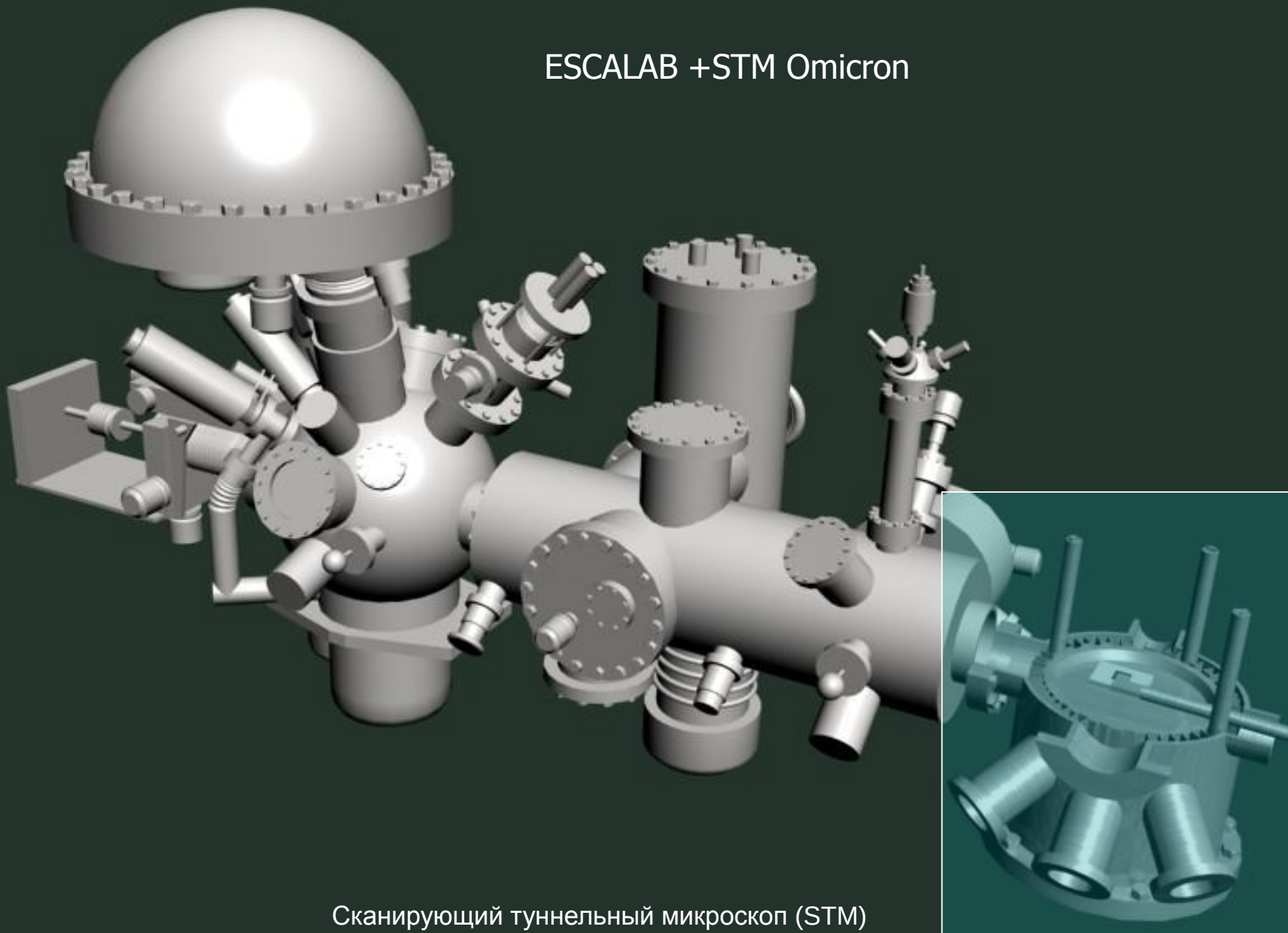
H. Berger and L. Forró

Institut de Physique de la Matière Complexe, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland
(Received 30 March 2007; published 4 October 2007)



ARPES-исследования

ESCALAB +STM Omicron



Сканирующий туннельный микроскоп (STM)

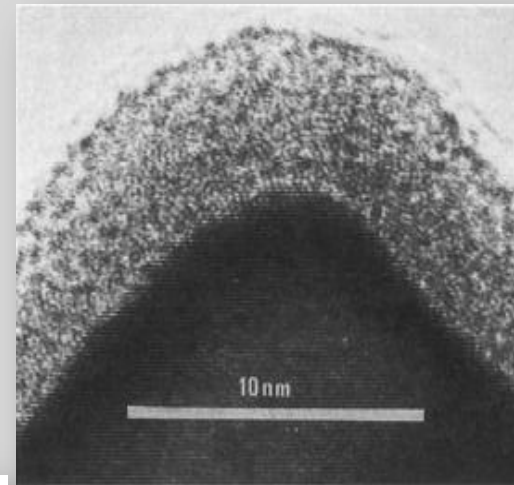
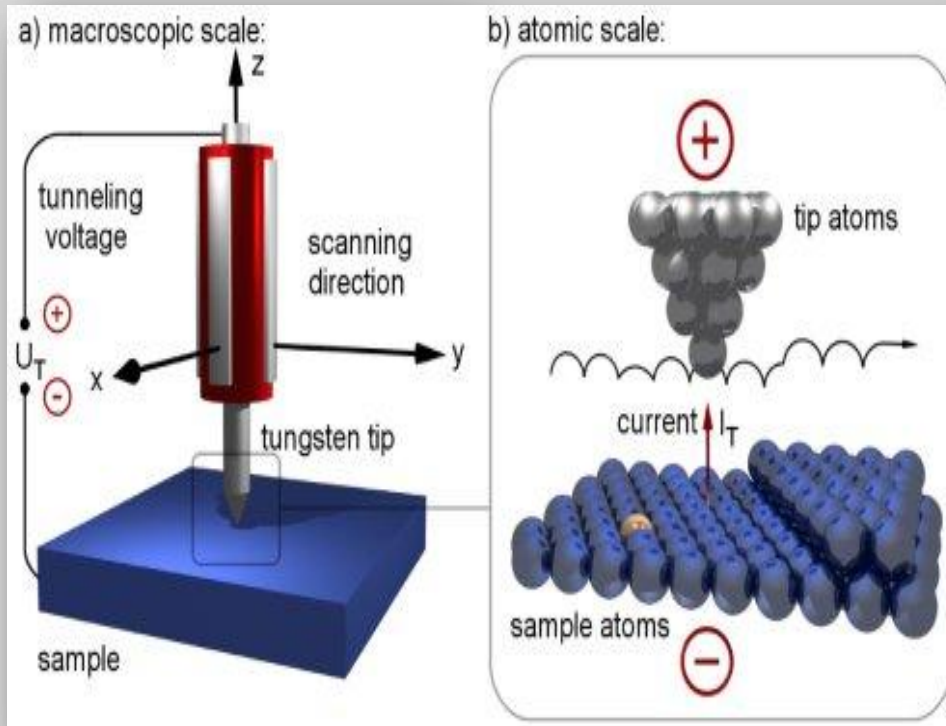
СКАНИРУЮЩАЯ ТУНЕЛЬНАЯ МИКРОСКОПИЯ (СТМ)



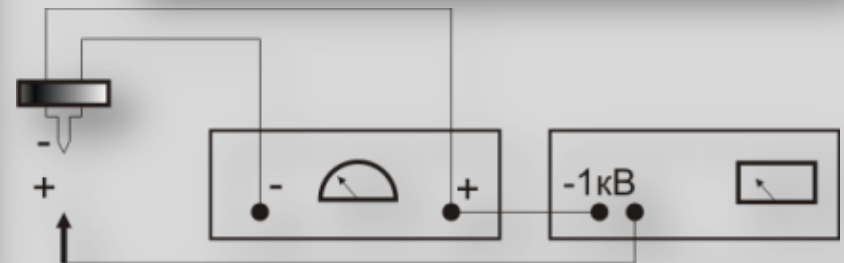
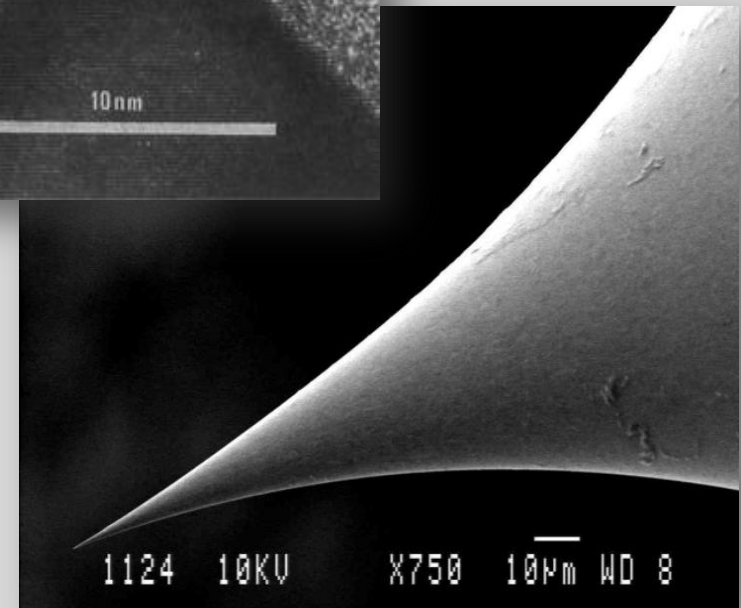
Приготовление W-иглы отжигом в вакууме с помощью е-пучка

Вакуумная ячейка отжига
W-иглы

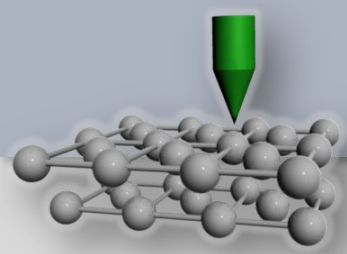
Компьютерная модель ячейки
отжига W-иглы



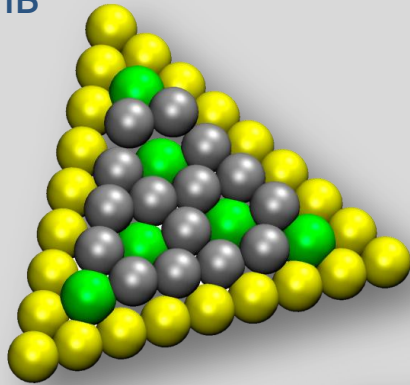
W-игла СТМ



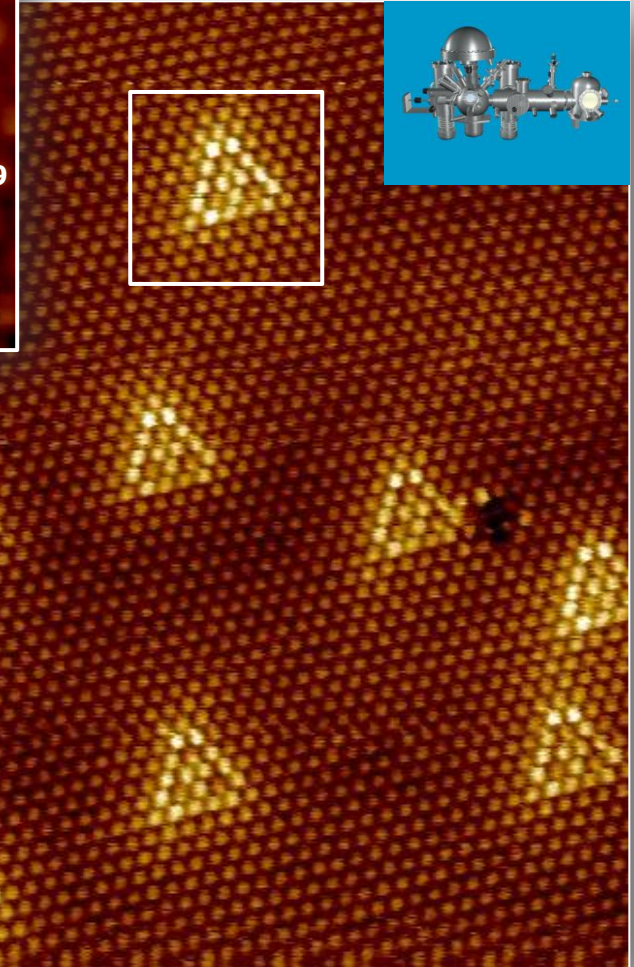
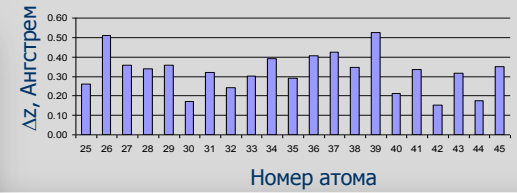
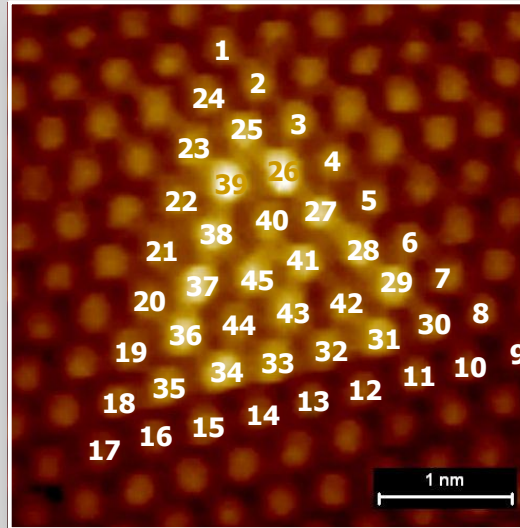
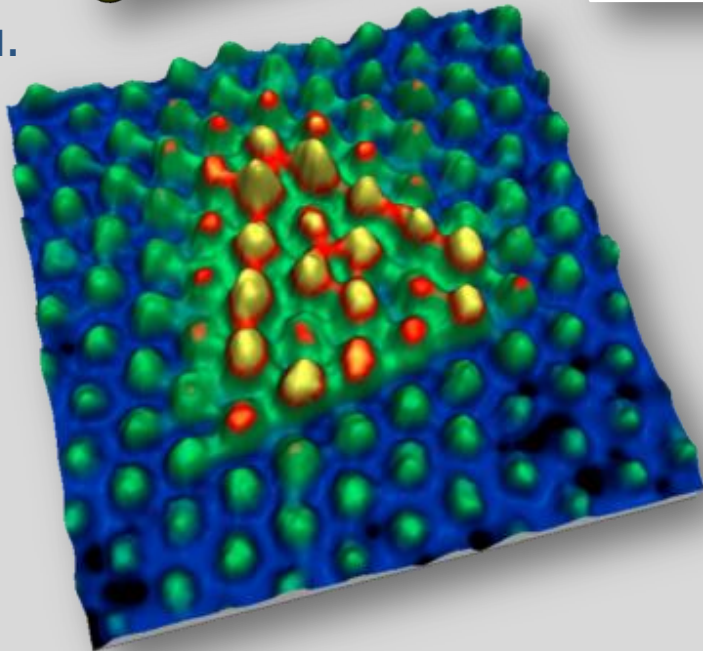
СТМ-МИКРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ TiSe_2

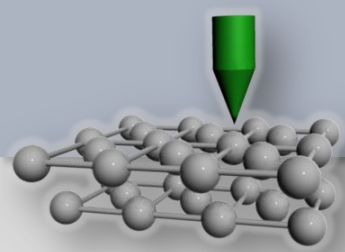


Модель

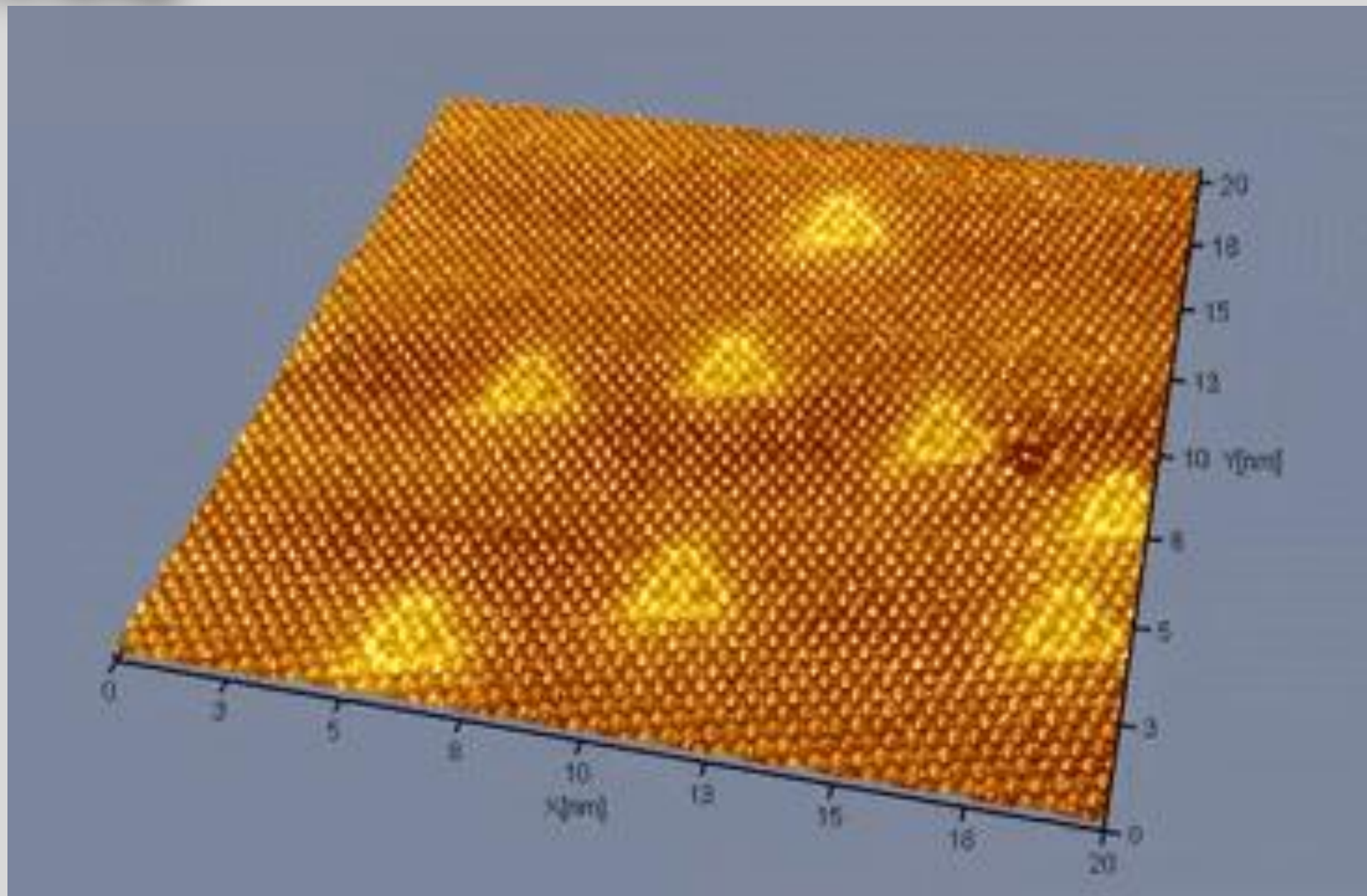


Эксп.

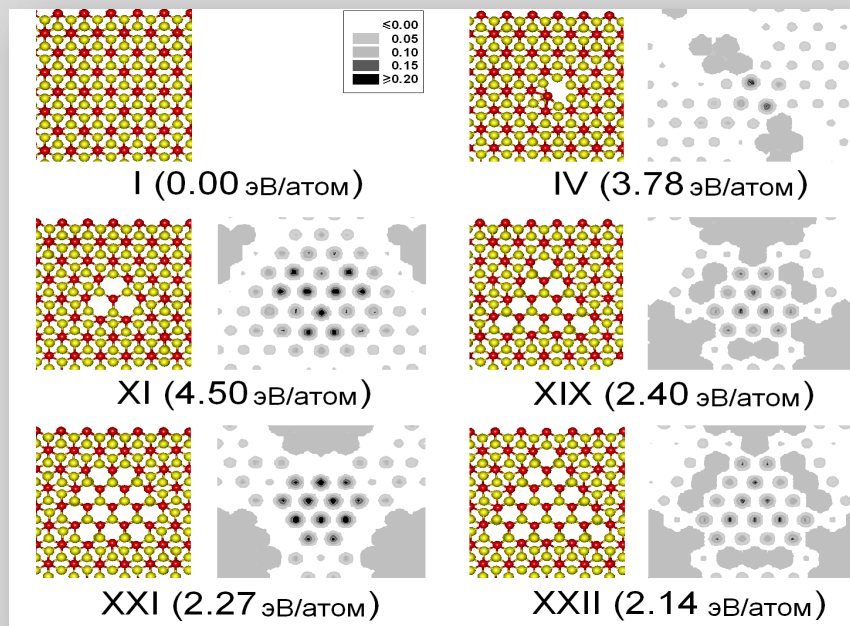




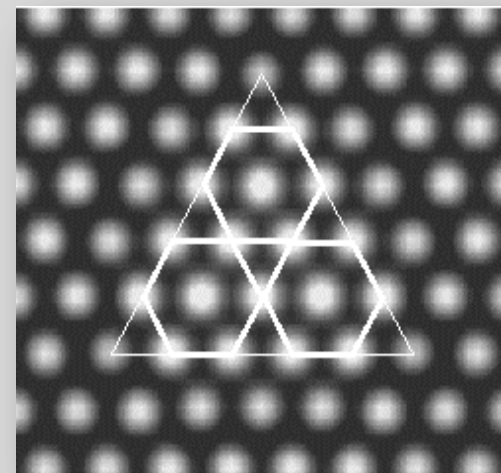
СТМ-МИКРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ TiSe_2



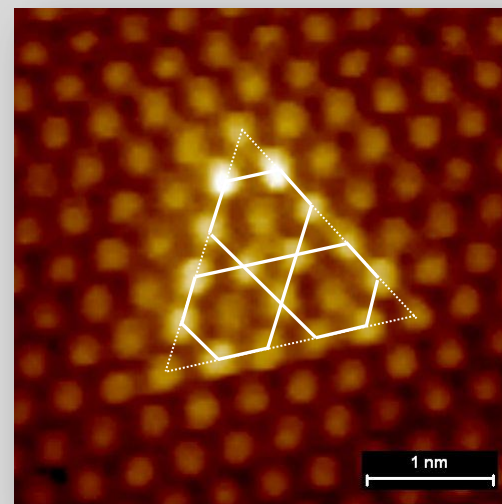
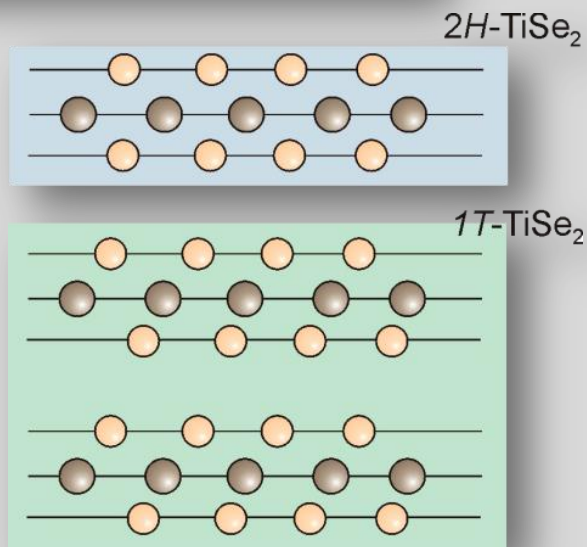
DFTB-расчеты топологии поверхности дихалькогенида $1T$ - TiS_2 с различными дефектами упаковки



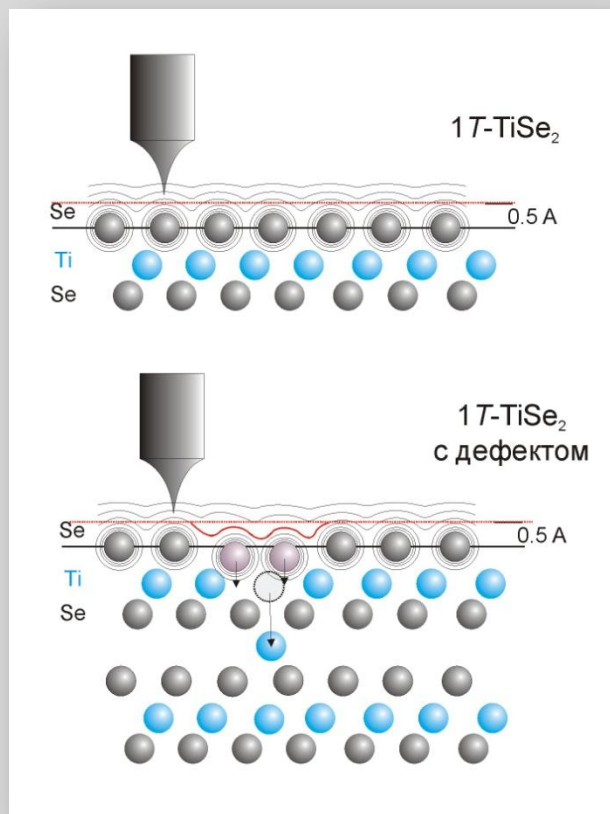
DFTB-расчет



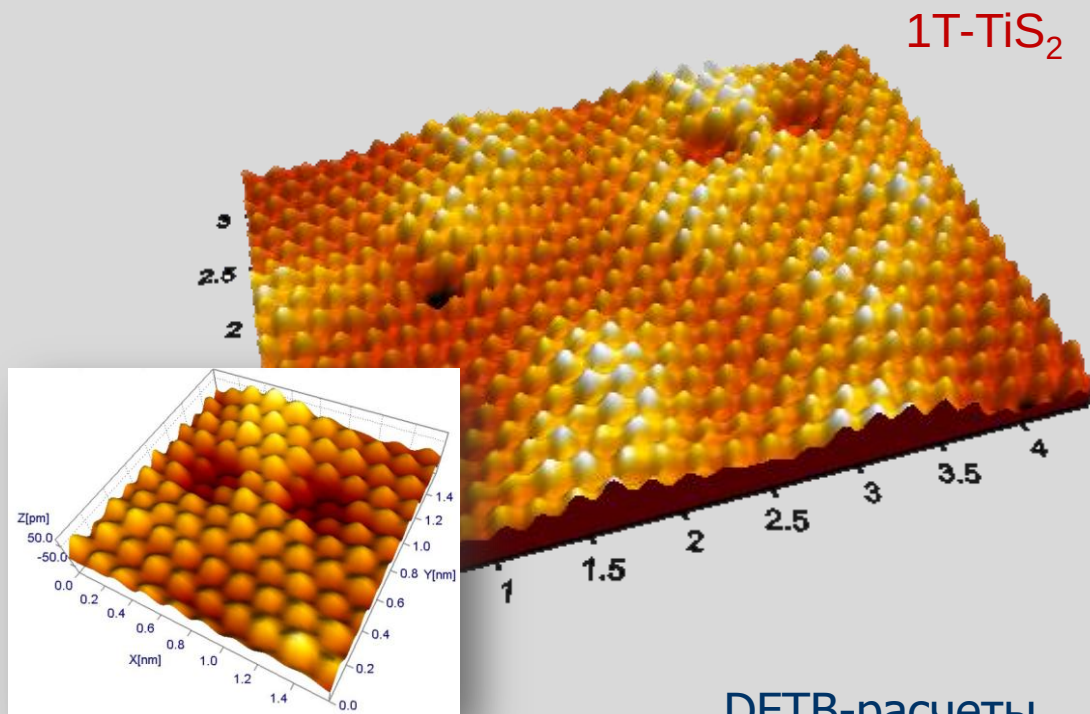
СТМ-эксперимент



Сканирующая туннельная микроскопия поверхности TiS_2



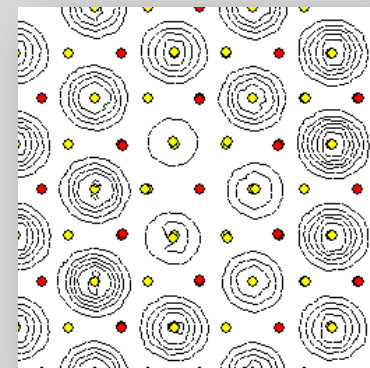
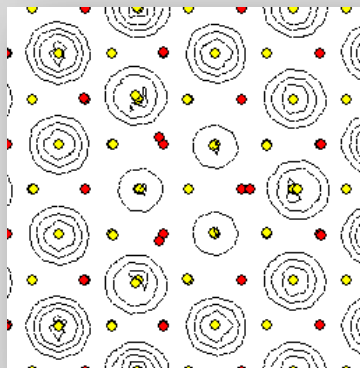
Неоднозначность СТМ-изображений
СТМ-микроскопия идеальной поверхности
и поверхности с дефектом



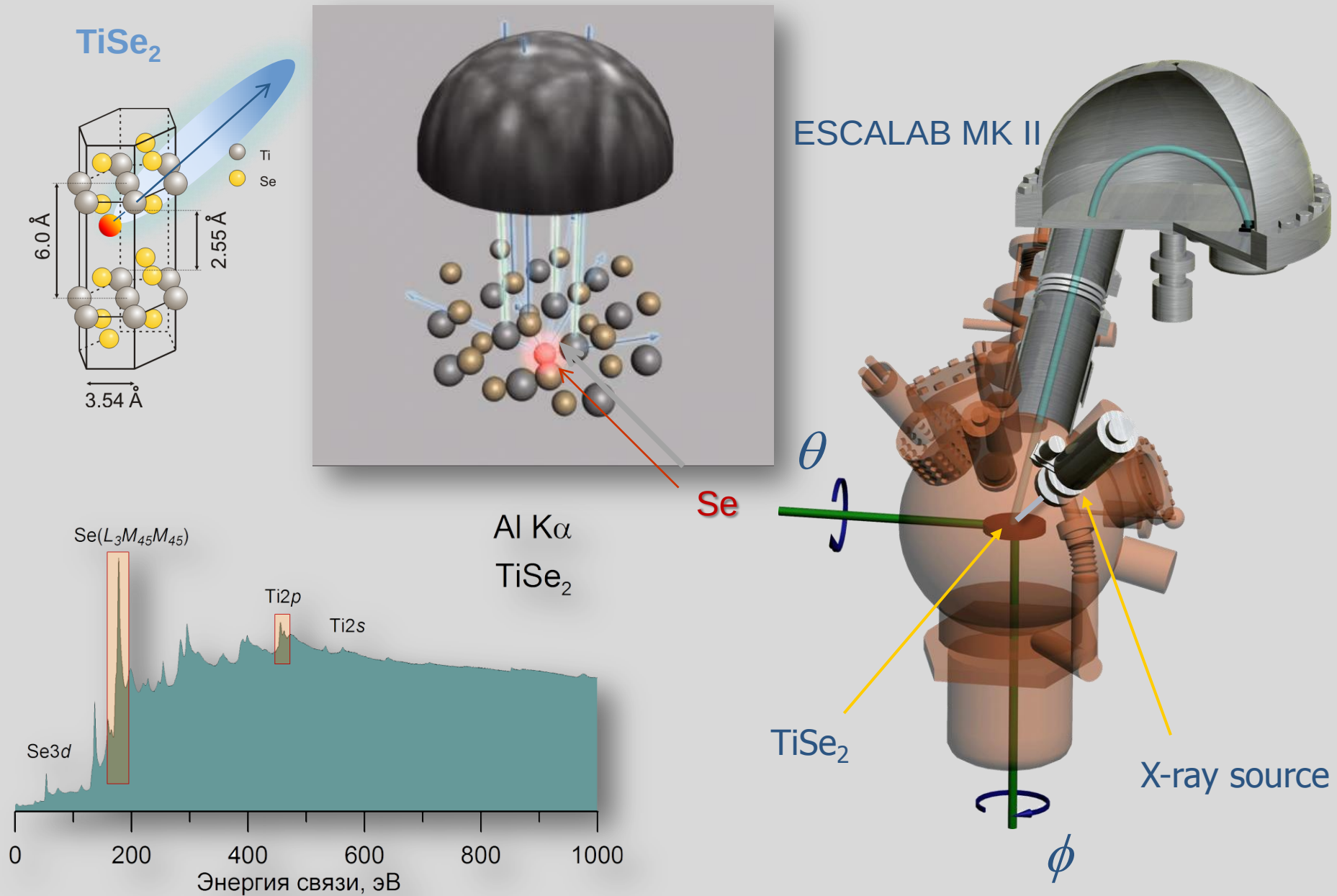
DFTB-расчеты

вакансия атома S под поверхностью

вакансия атома Ti



Фотоэлектронная дифракция 1T-TiSe₂



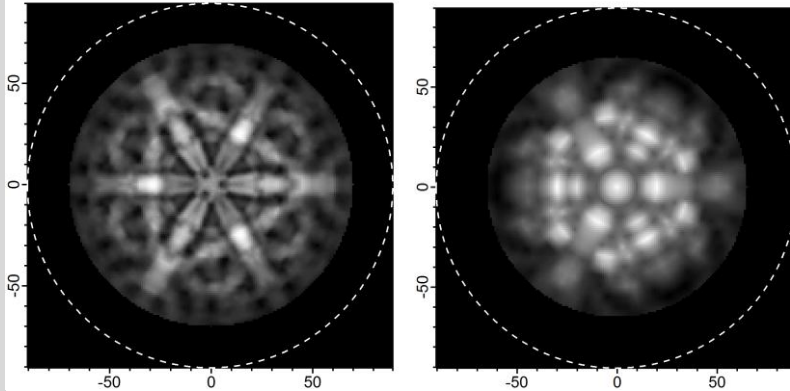
РФД-моделирование релаксационных эффектов на поверхности $1T\text{-TiSe}_2$



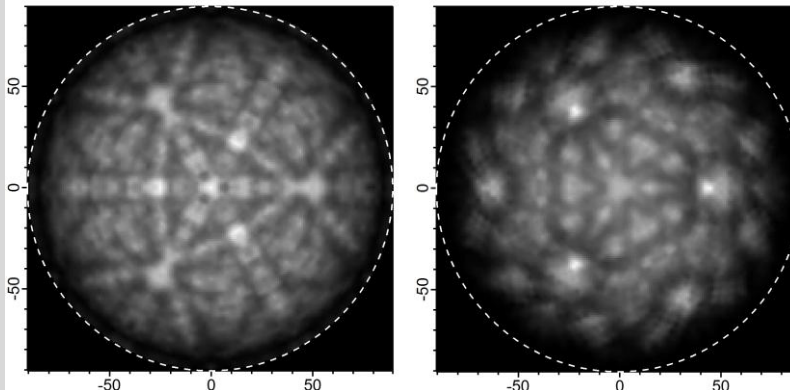
ХРД-эксперимент

Se(LMM)

Ti2p

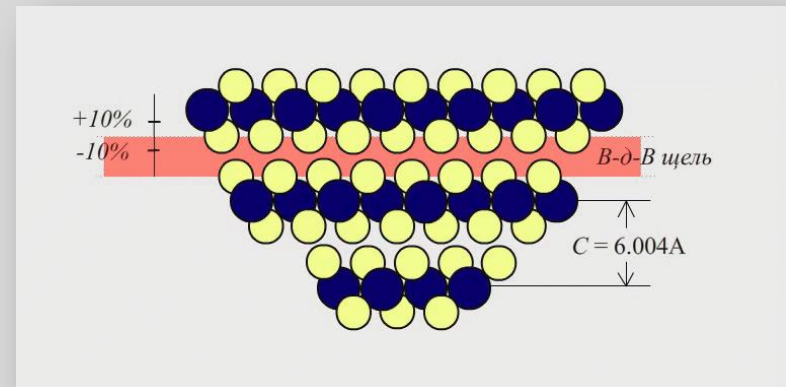


MSC-расчеты



Детальная интерпретация РФД картин требует расчета РФД-картин от кластеров с перебором всех возможных вариантов параметров структуры и позиций атомов.

РФД-расчеты проведены в MSC-SW приближении с помощью EDAC-кода (F. J. García de Abajo, M. A. Van Hove, and C. S. Fadley, Phys. Rev. B 63, 75404 (2001))



0.2 nm



0.275 nm



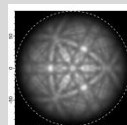
0.325 nm



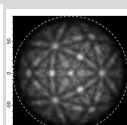
0.375 nm



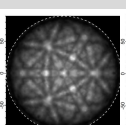
0.5 nm



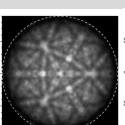
0.1 nm



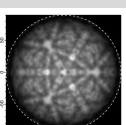
0.25 nm



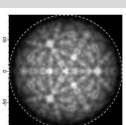
0.3 nm



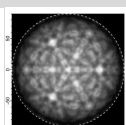
0.35 nm



0.4 nm



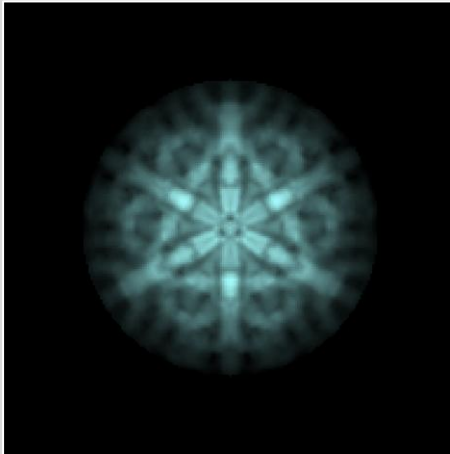
0.6 nm



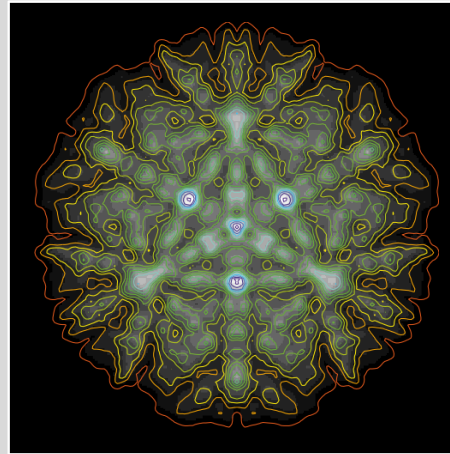
$D: 0,1 \dots 0,6$

Se(LMM)

XPD-эксперимент

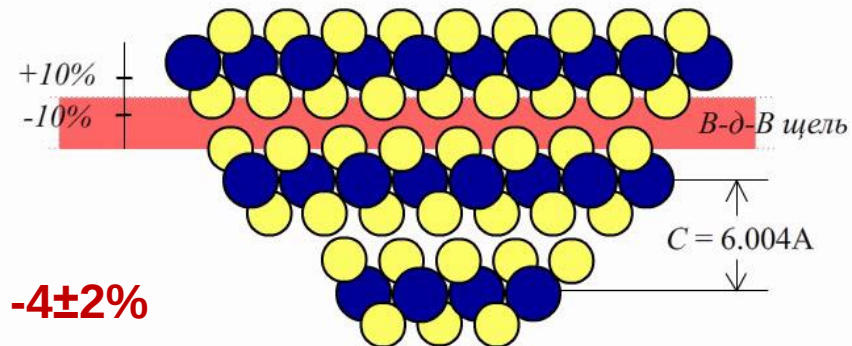
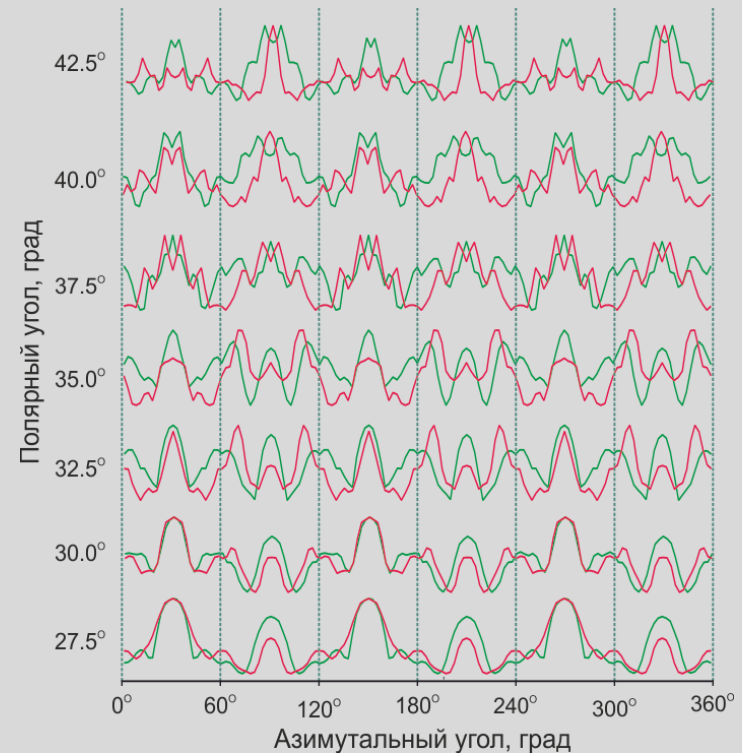


XPD-расчет



$$R = \sum \left| |I_{\text{эксп}}| - |I_{\text{теор}}| \right| / \sum |I_{\text{эксп}}|$$

Серия экспериментальных (зеленая линия) и теоретических (красная линия) азимутальных зависимостей распределения интенсивности фотоэмиссии Se(LMM), $E_{\text{кин}} = 1310 \text{ эВ}$.

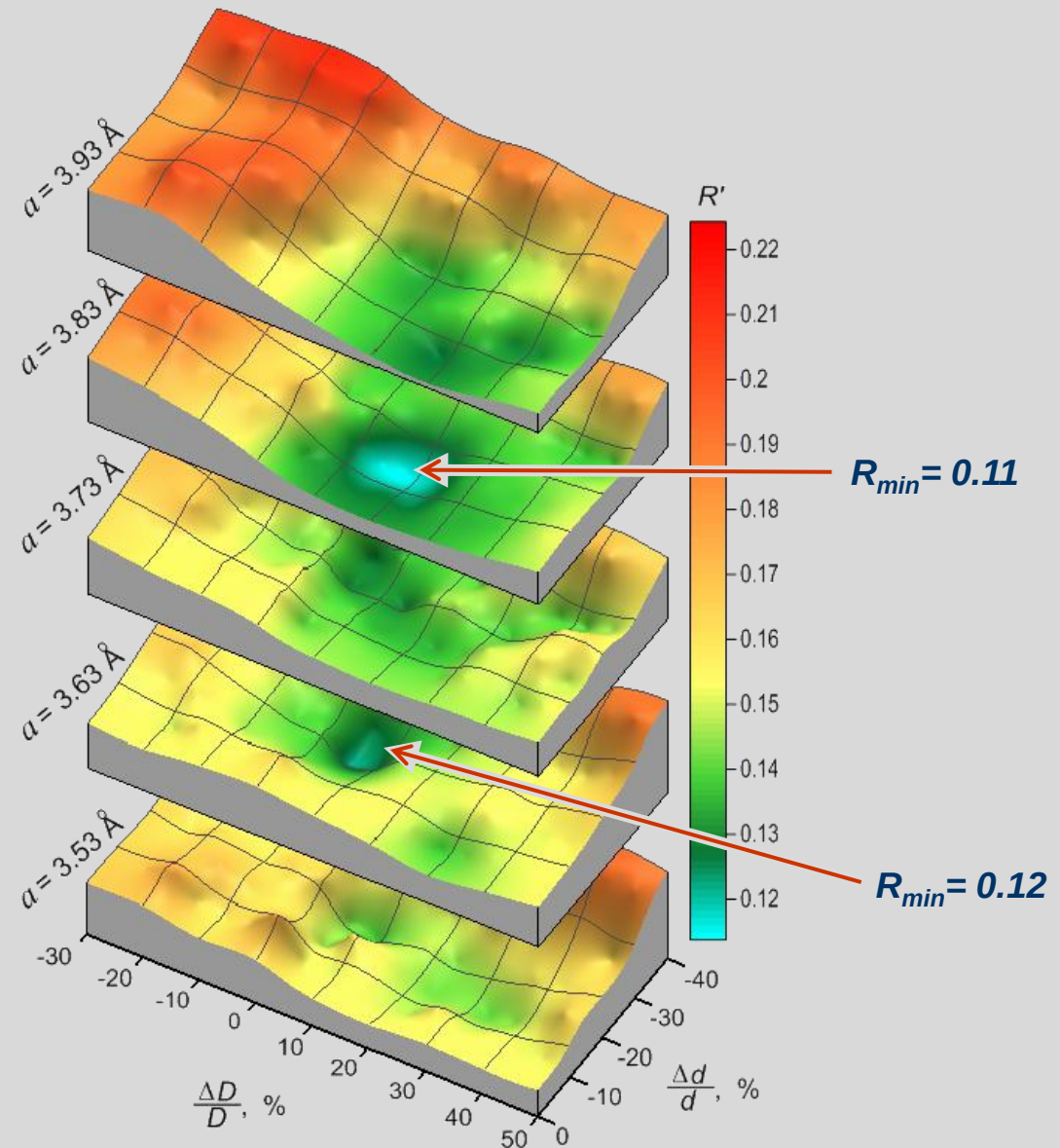
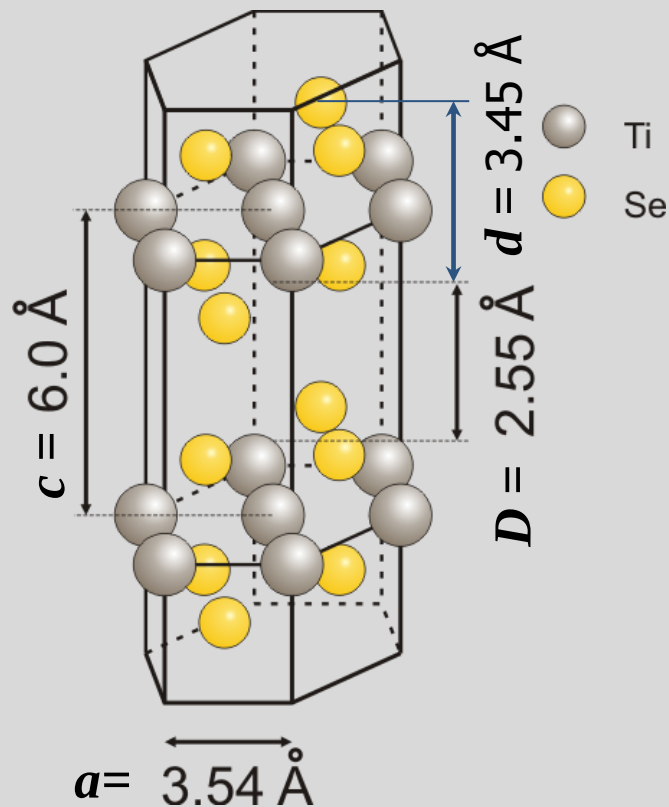


РФД-моделирование релаксационных эффектов на поверхности 1T-TiSe₂



$$R = \sum_n \left| \chi_n^{\text{exp}} - \chi_n^{\text{th}} \right| / \sum_n \left| \chi_n^{\text{exp}} \right|$$

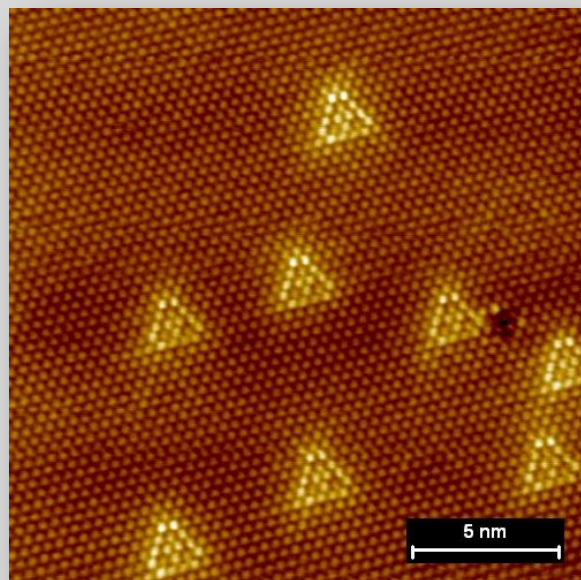
$$\chi_n = \left| I_n^{\text{max}} - I_n^{\text{min}} \right| / I_n^{\text{max}}$$



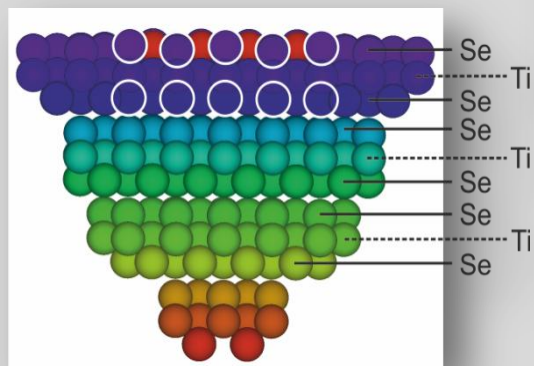
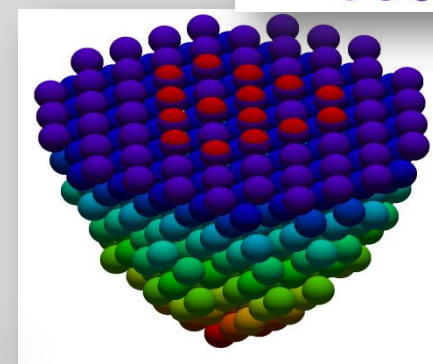
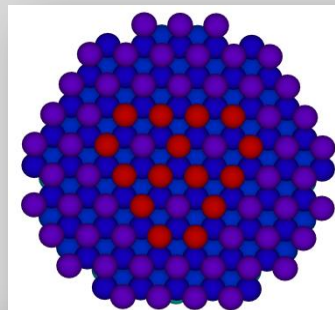
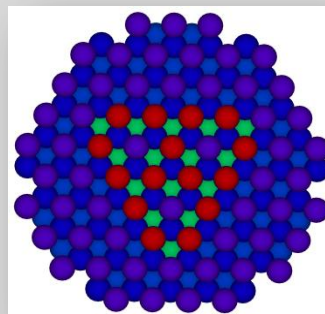


Атомы в «треугольной» структуре
приподняты на 0.4 ангстрем

Окружение атома Ti изменено с
октаэдрического на
призматическое:
 $1T\text{-TiSe}_2 \rightarrow 2H\text{-TiSe}_2$

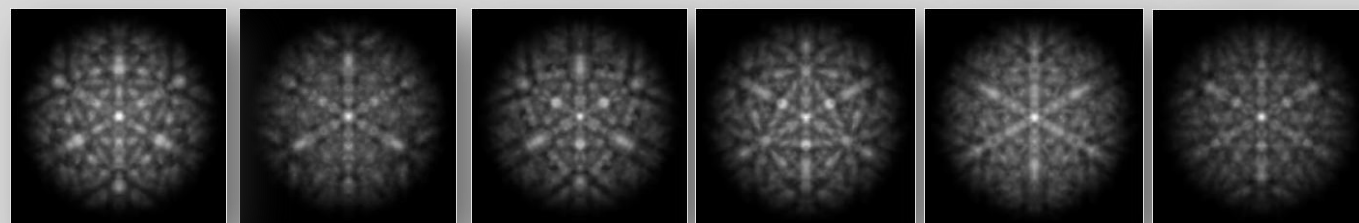
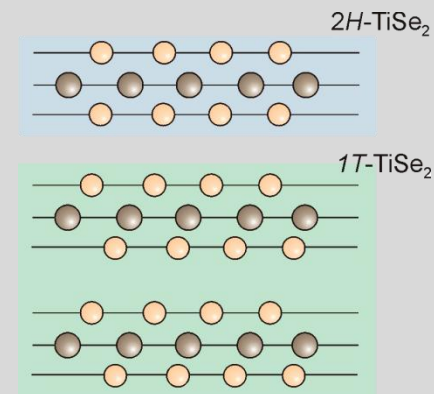
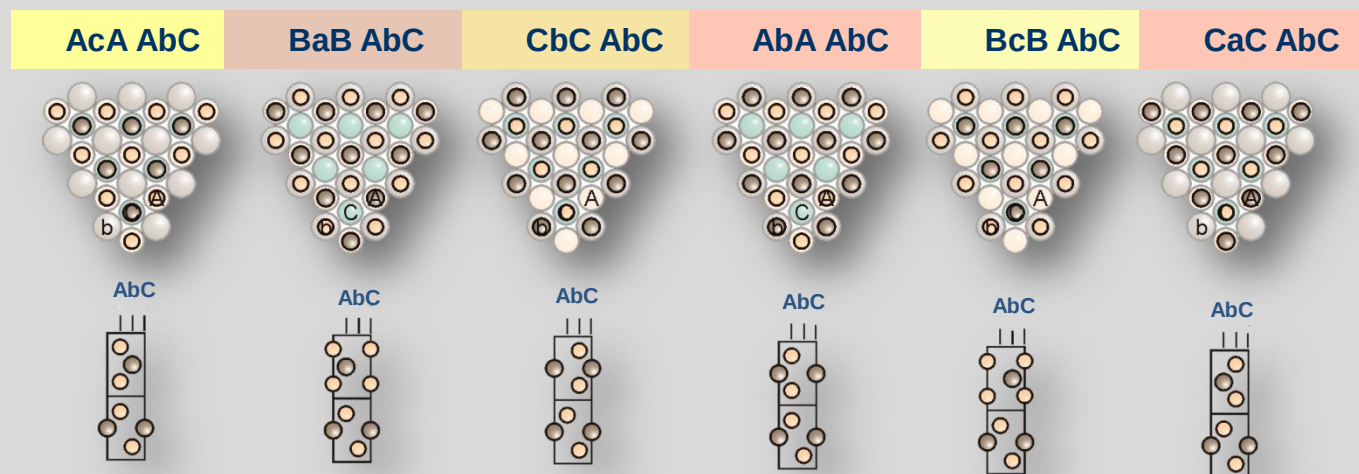


Поверхность 1T-TiSe₂, $T=300$ К.
СТМ-изображение



Параболический кластер для
EDAC-моделирования РФД

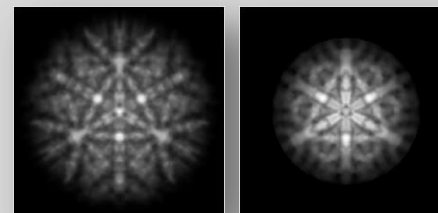
РФД-моделирование структурных дефектов упаковки 2H-TiS₂ на поверхности 1T-TiS₂



0.0600	0.0574	0.0548	0.0585	0.0611	0.0576
--------	--------	--------	--------	--------	--------

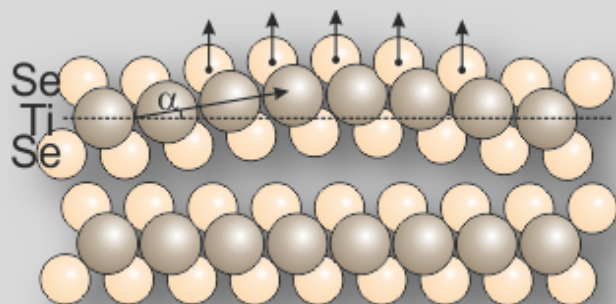
R-фактор

для 1T-TiSe₂ $R_{min} = 0.043$



Теор.

Эксп.

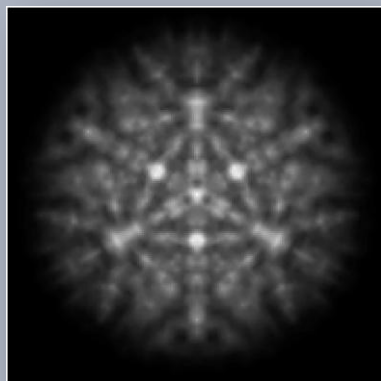


1T-TiS₂

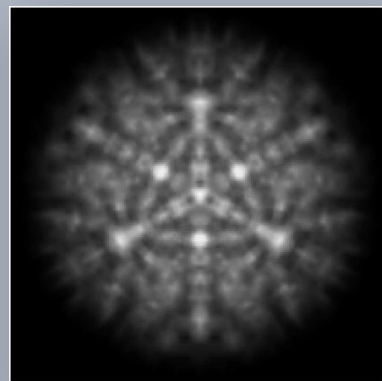
Se(LMM)



Эксперимент



1.72°



3.44°



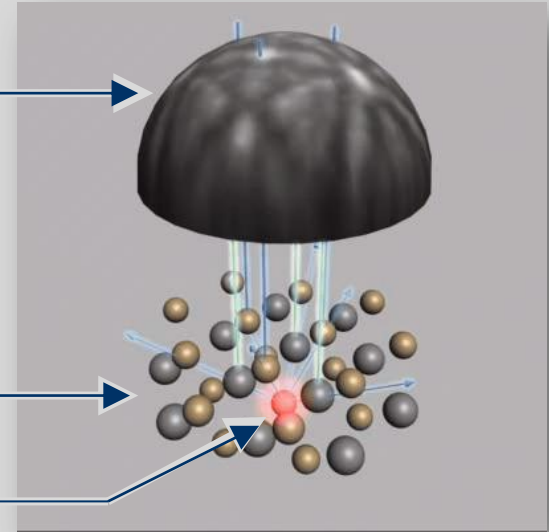
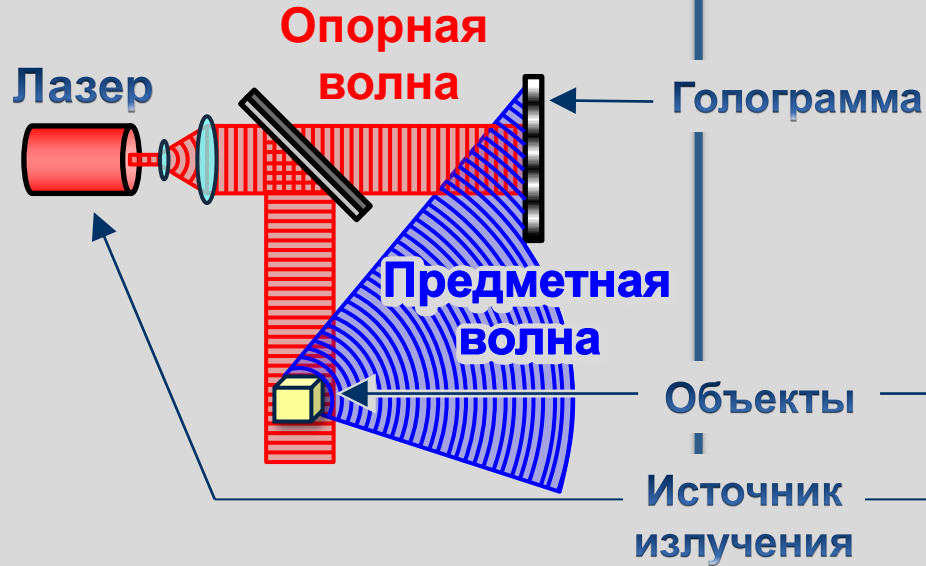
5.16°

Модель

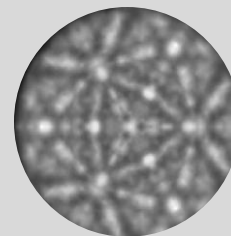
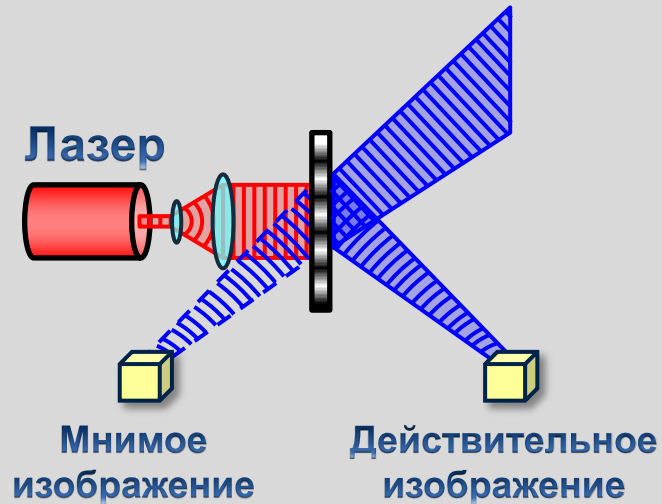
РФД-моделирование изгиба поверхности 1T-TiS₂



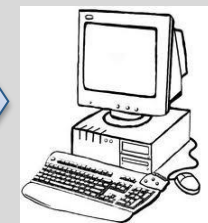
Запись



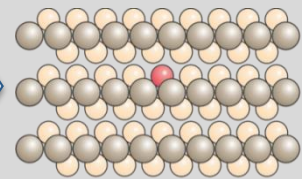
Восстановление



Голограмма



Численный метод



Реконструкция

Метод SPEA-MEM

(scattering pattern extraction algorithm with maximum entropy method)



e-Journal of Surface Science and Nanotechnology

2 April 2011

e-J. Surf. Sci. Nanotech. Vol. 9 (2011) 153-157

Conference - Atomic Holography 2010 -

Reconstruction Algorithm for Atomic Resolution Holography*

T. Matsushita[†]

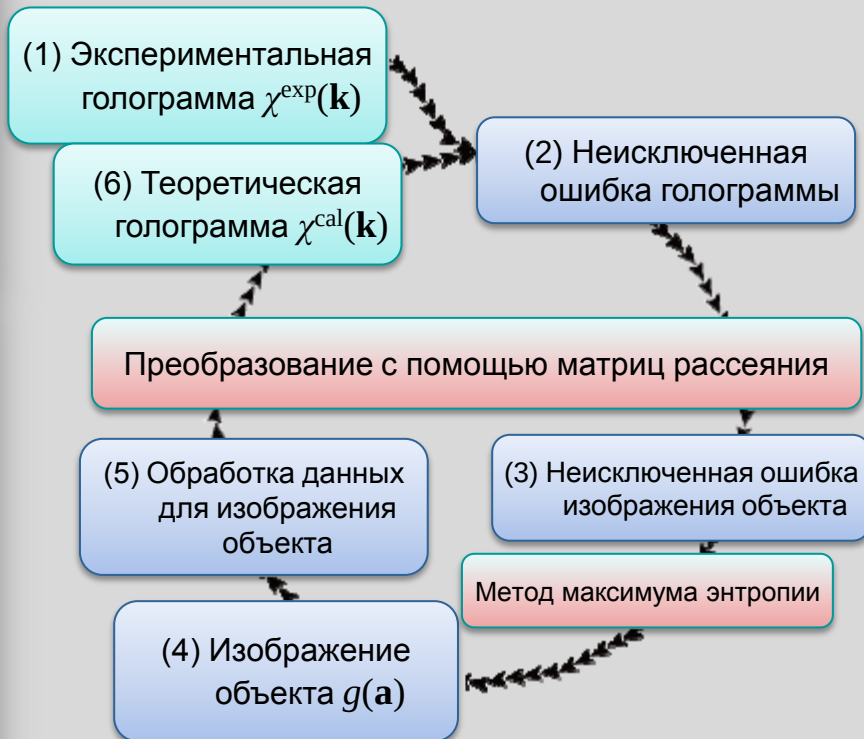
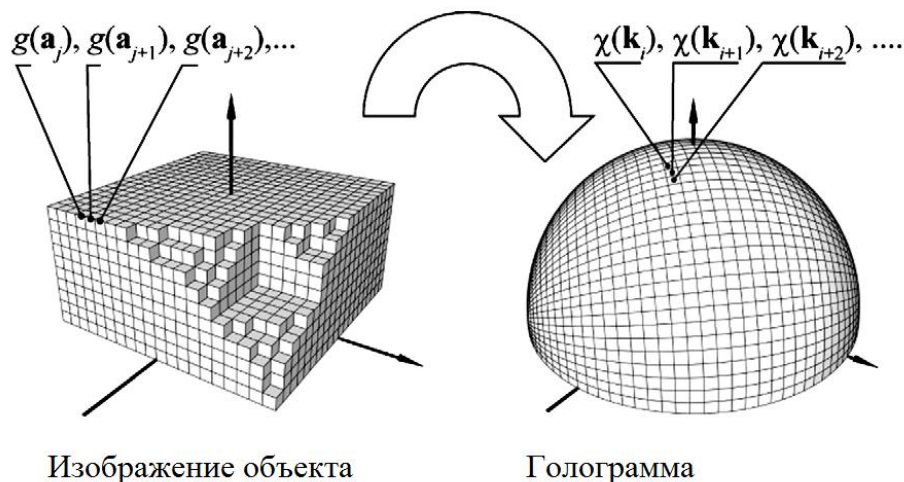
Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI),
SPring-8, 1-1-1 Koto Sayo, Hyogo 679-5198, Japan

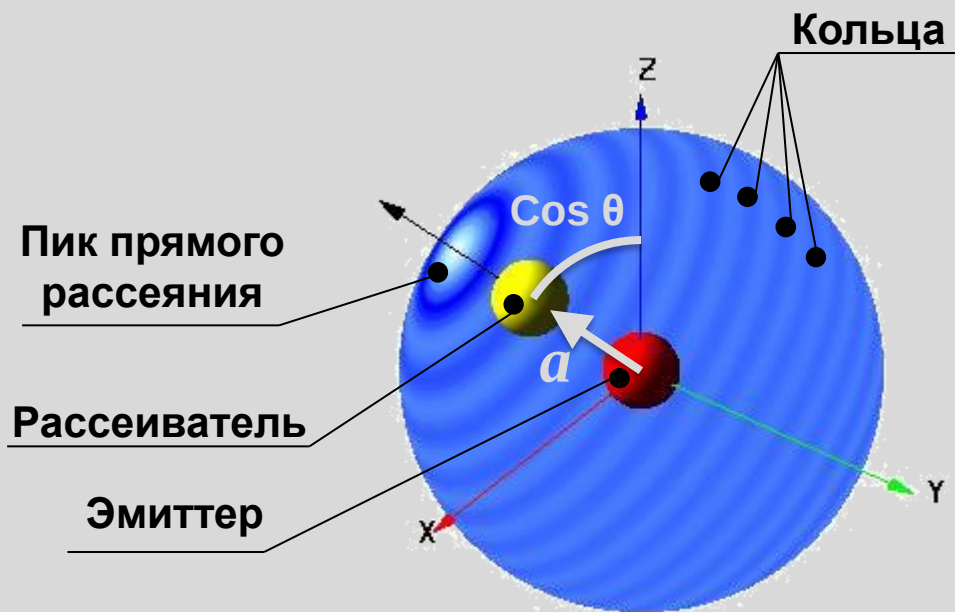
F. Matsui and H. Daimon

Nara Institute of Science and Technology (NAIST),
8916-5 Takayama, Ikoma, Nara 630-0192, Japan

K. Hayashi

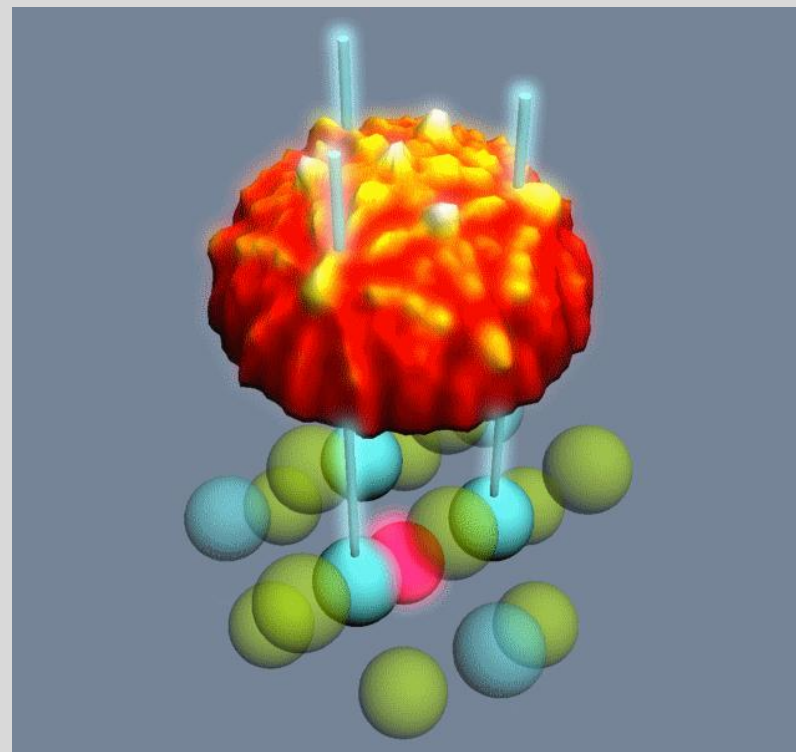
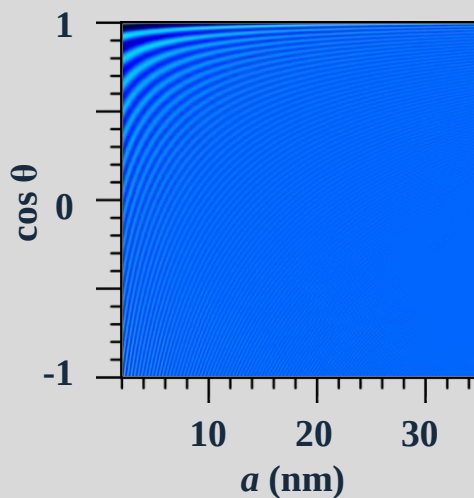
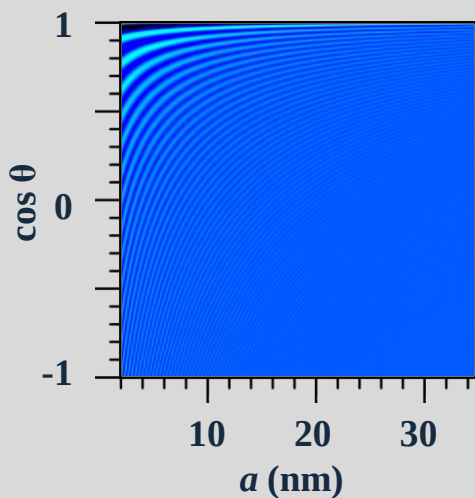
Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan
(Received 30 November 2010; Accepted 15 February 2011; Published 2 April 2011)





s-wave, $E_k=1310\text{eV}$, Se

s-wave, $E_k=1030\text{eV}$, Ti



Scattering patterns

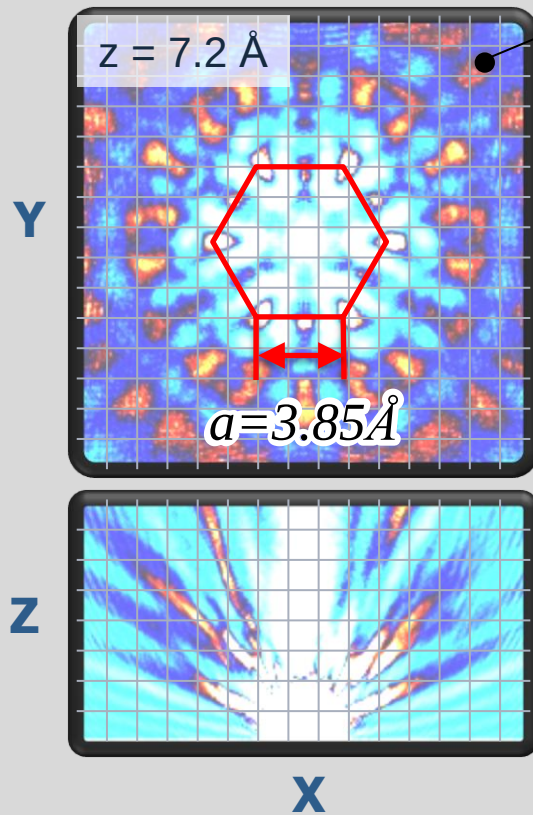
Матрицы рассеяния для эмиссии из состояния Se(LMM)

Фотоэлектронная голография

Учет операций трансляционной симметрии

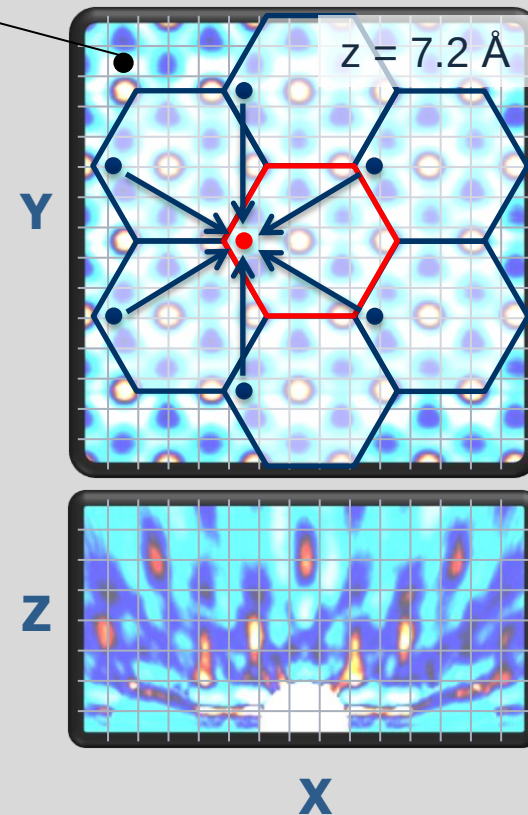


Измерение
параметра решетки a



воксели

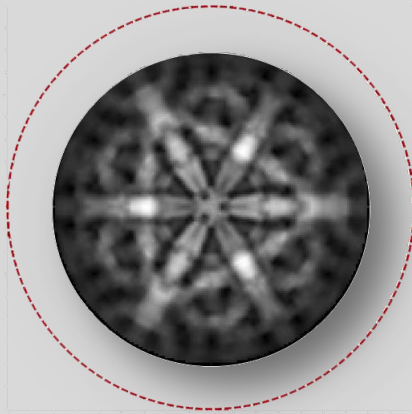
Усреднение вокселей для заданной
двухмерной гексагональной ячейки



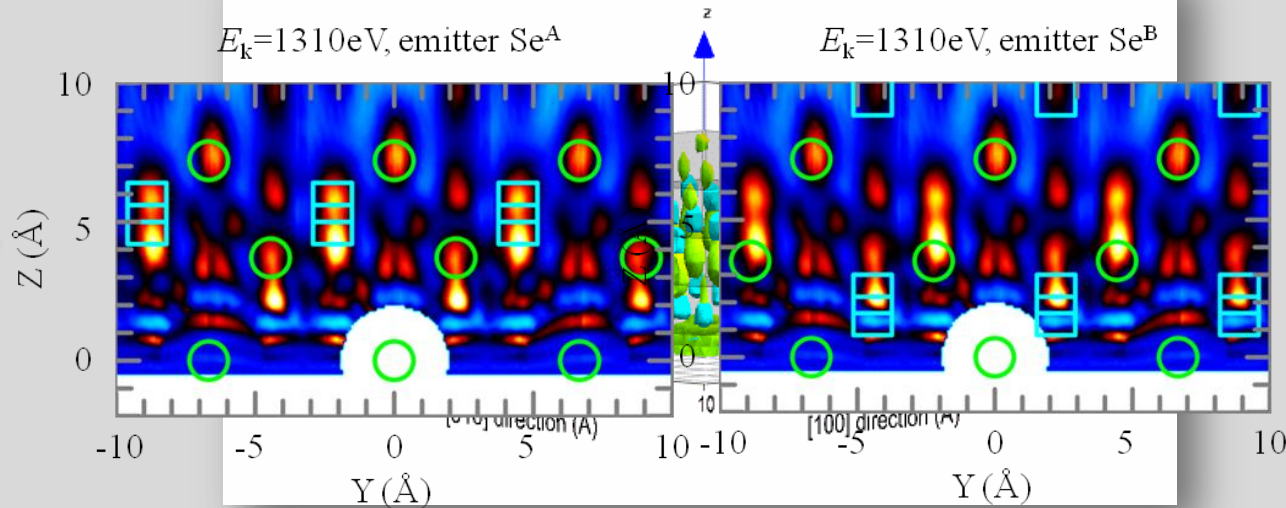
Фотоэлектронная голография на поверхности 1T-TiSe₂



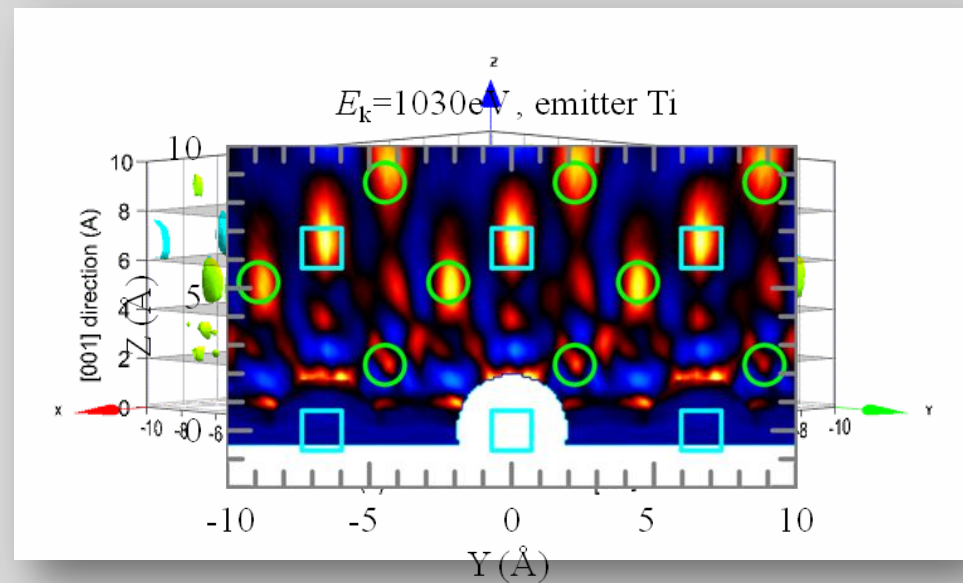
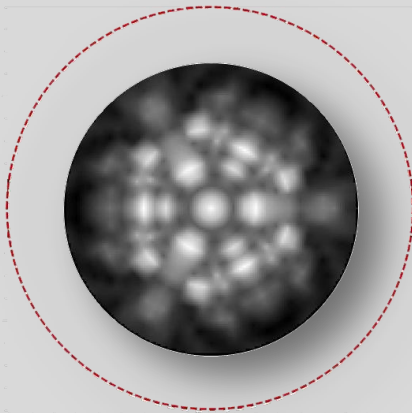
Se (эксперимент)



3D-реконструкция



Ti (эксперимент)



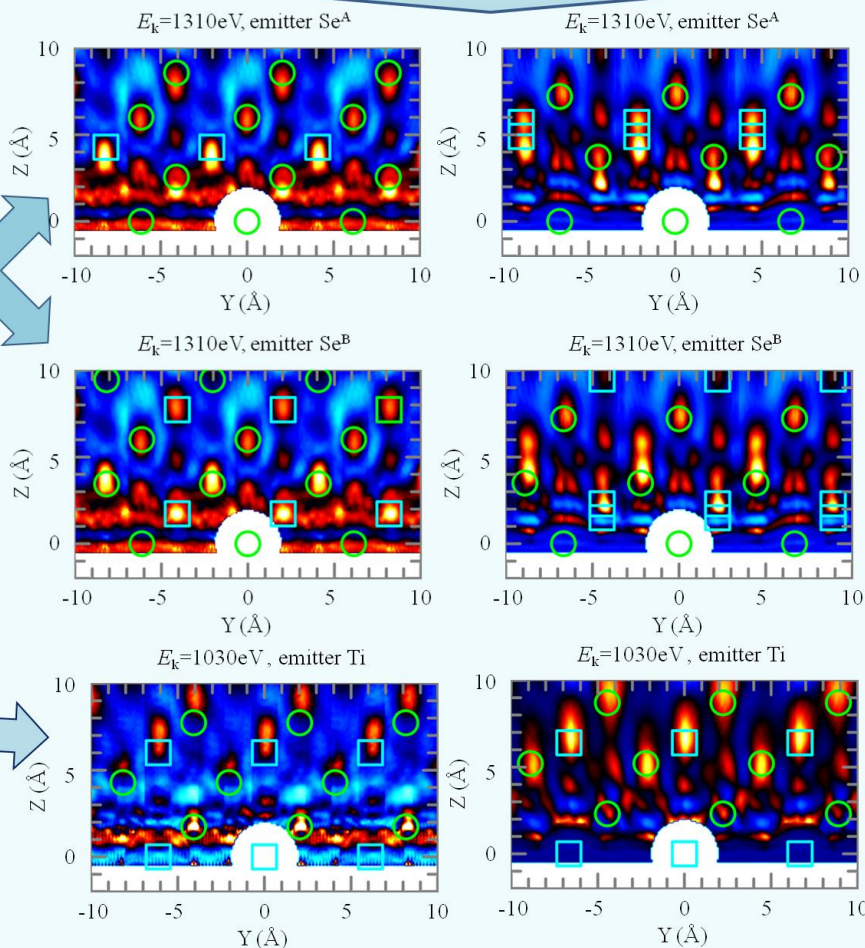
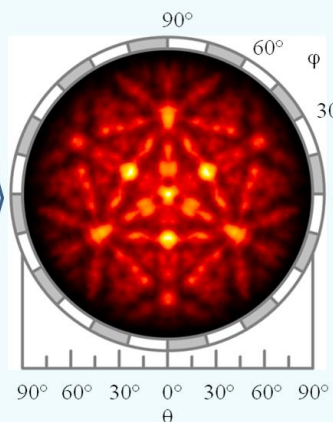
Расчётные РФД-картины от
модельного кластера TiSe_2
(EDAC-код)

Восстановление РФД-картин как голограмм (SPEA-MEM).

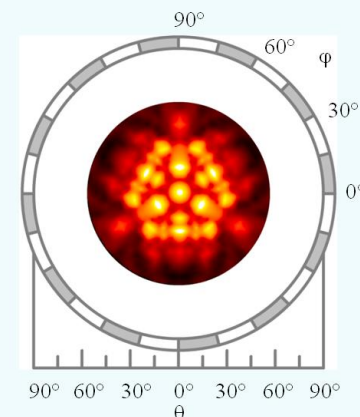
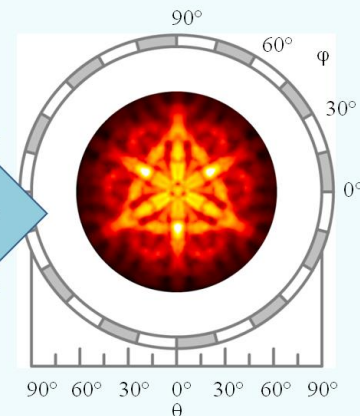
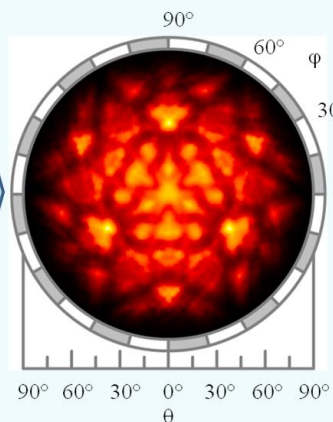
Сечения в плоскости (110) 3D-изображения
ближайшего окружения эмиттеров

Экспериментальные
РФД-картины
от монокристалла TiSe_2

Se ○



Ti □

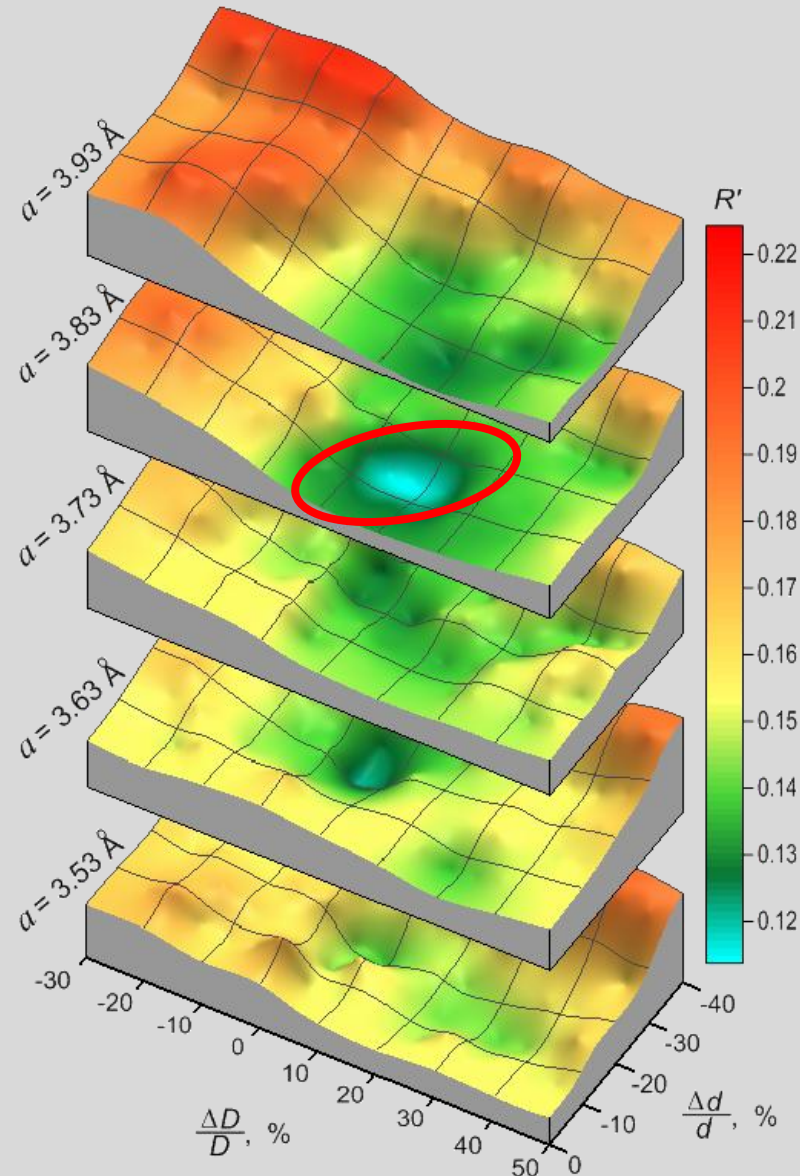
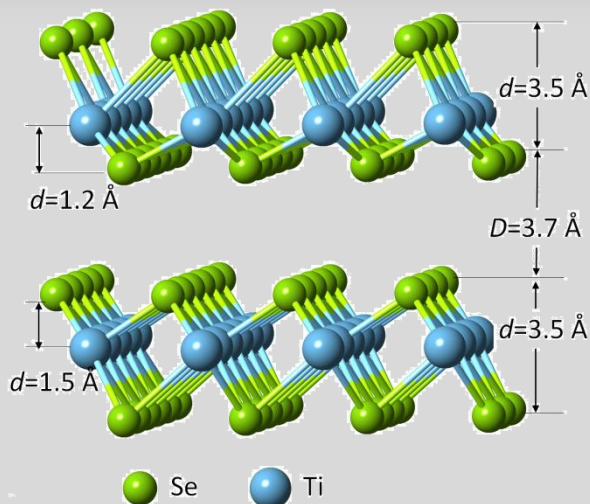
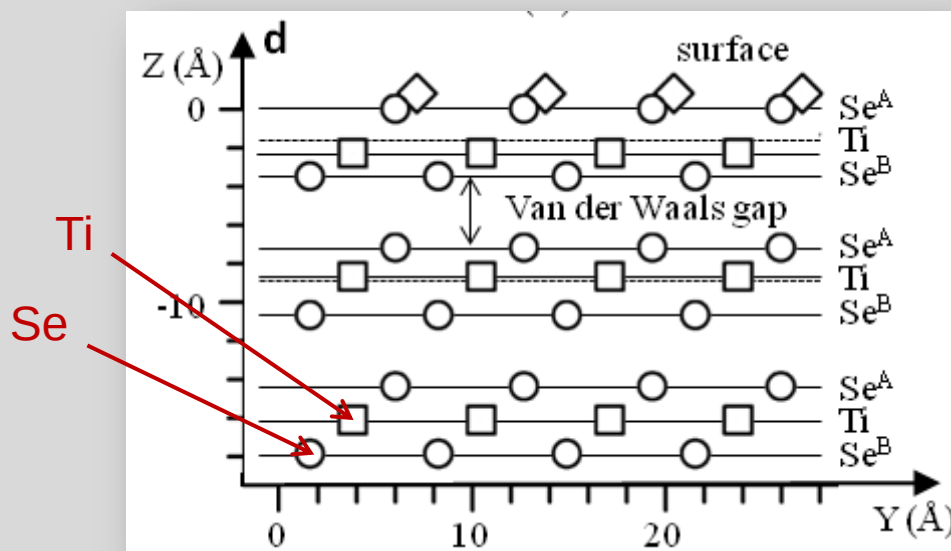


Реконструкция структуры TiSe_2 ,
охватывающей 128 атомов трёх поверхностных слэбов Se-Ti-Se.

Реконструкция структуры поверхности 1T-TiSe₂



Реконструкция структуры TiSe₂, охватывающей 128 атомов трёх поверхностных слэбов Ti-Se-Ti.



Голографическая реконструкция дает усредненную структуру:
Требуется уточнение путем определения конкретных дефектов



Квазиупорядоченные NbO_x -структуры на поверхности ниобия (110)

Октябрь 2010 г.

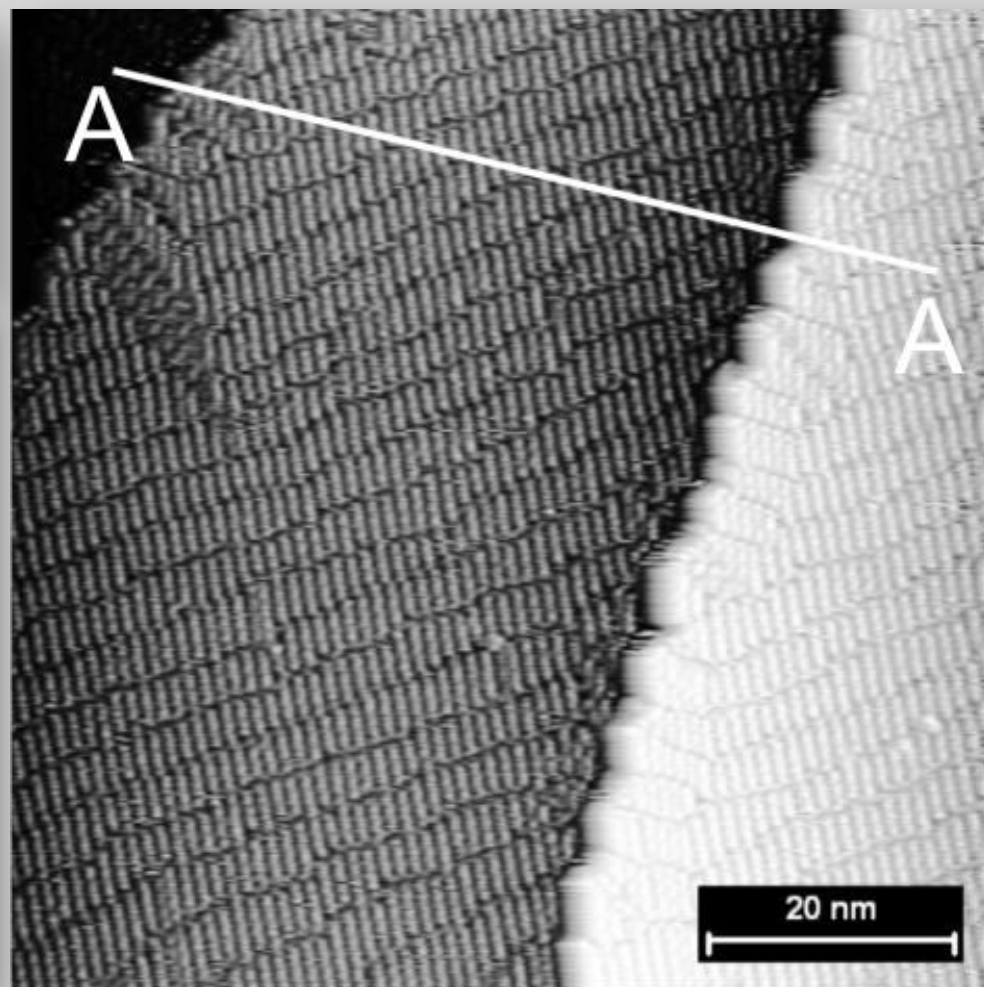
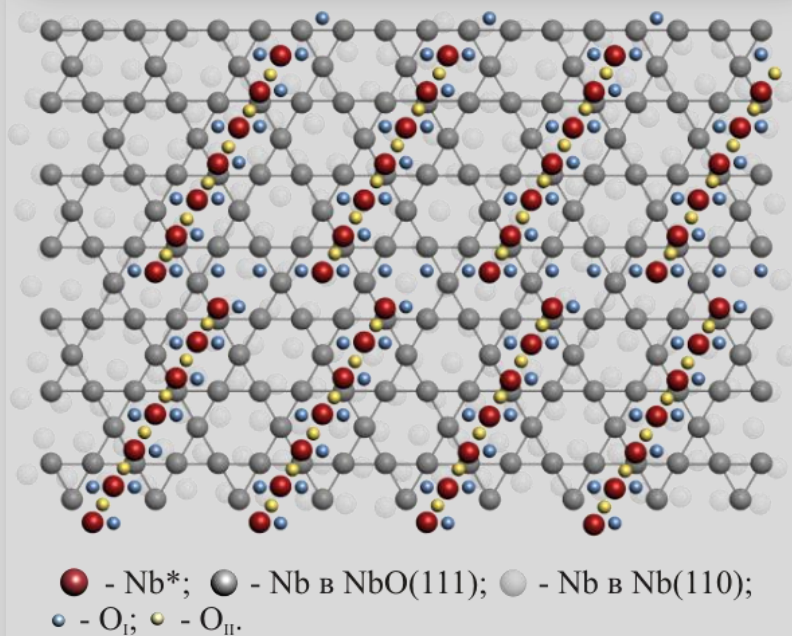
УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

Том 180, № 10

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Оксидные наноструктуры на поверхности ниобия
и родственные системы: эксперименты и *ab initio* расчёты

М.В. Кузнецов, А.С. Разинкин, А.Л. Ивановский



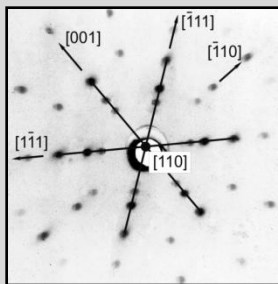


Структура исследовательской работы



Атомная модель низкоразмерных периодических структур Nb-O на поверхности Nb(110)

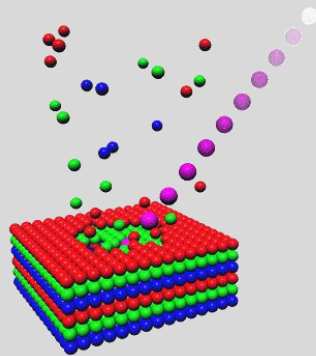
Подготовка поверхности и синтез структуры Nb-O/Nb(110)



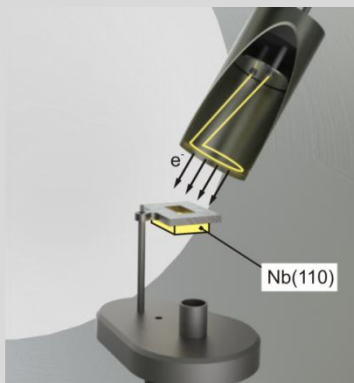
Ориентировка, резка,
механическая полировка
монокристалла Nb(110)



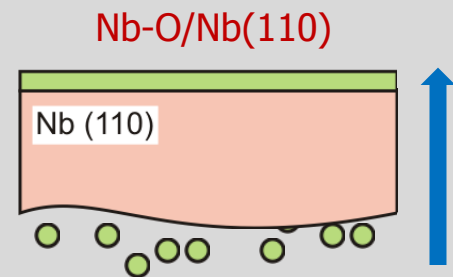
Подбор оптимальных режимов
и раствора для электро-
химической полировки



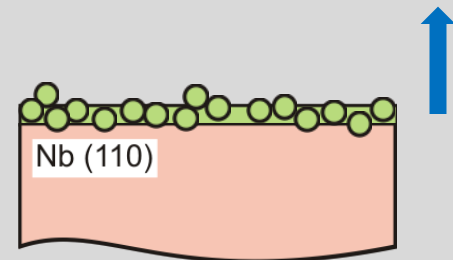
Травление поверхности
пучком ионов



Облучение поверхности
пучком электронов



Формирование поверхностной
квазипериодической структуры
Nb-O/Nb(110)

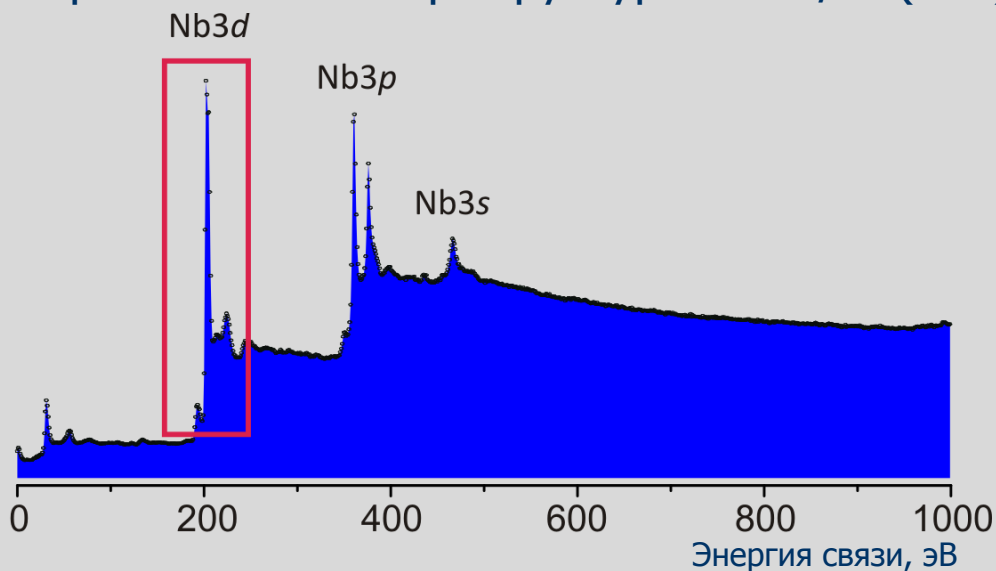


Поверхность монокристалла Nb(110)
после высокотемпературного отжига

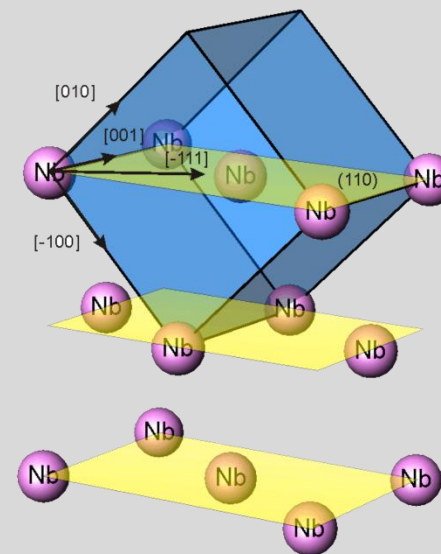
Подготовка поверхности

Подготовка образца в вакууме

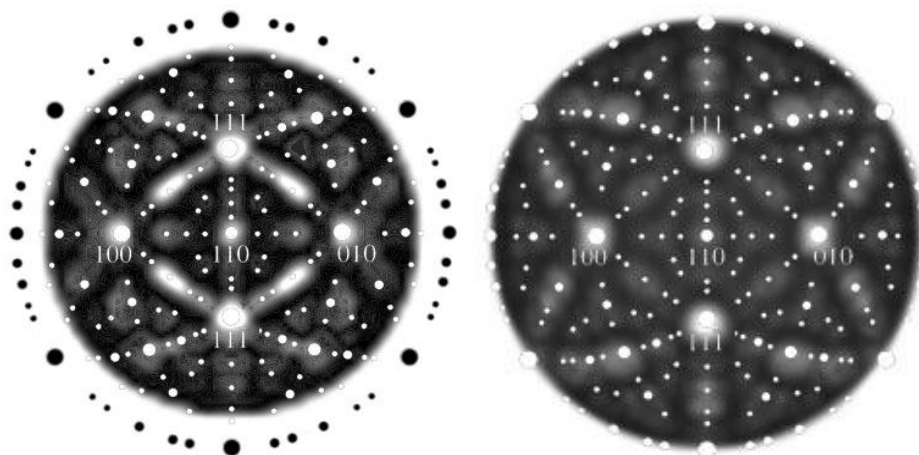
Обзорный РФЭ-спектр структуры Nb-O/Nb(110)



Показано, что релаксационное сжатие поверхностных слоев Nb(110) не превышает 5%.



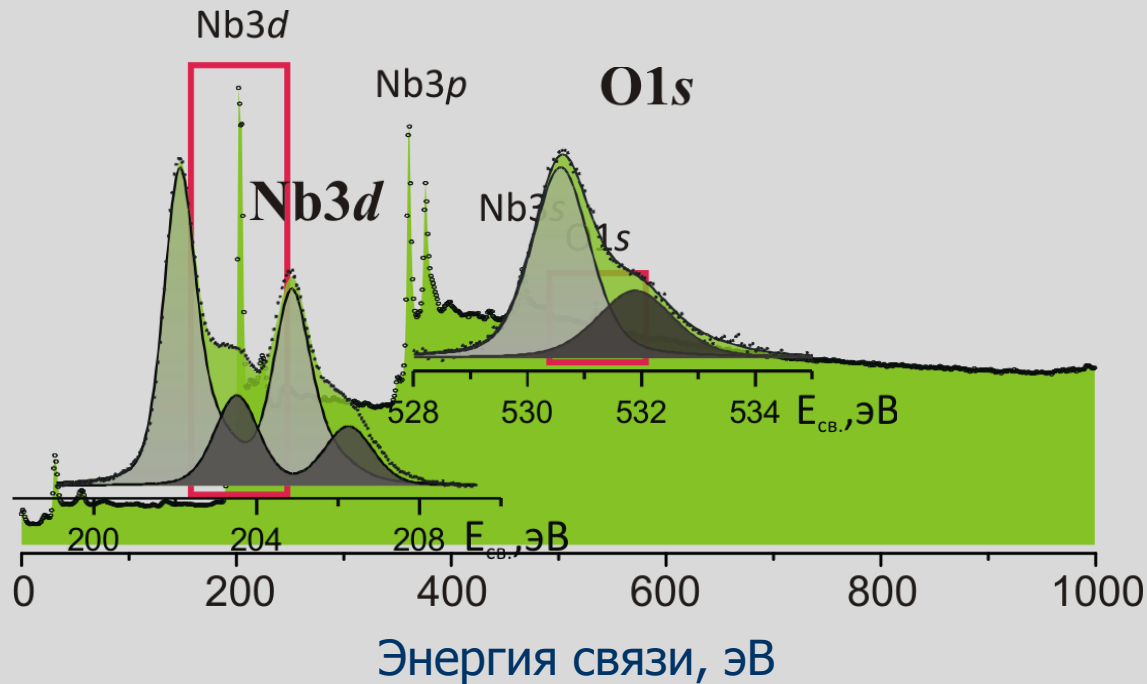
Ячейка, используемая для моделирования эксперимента по фотоэлектронной дифракции методом *SSC-SW*.



Экспериментальная и теоретическая 2p-дифракционные картины Nb3d-фотоэмиссии поверхности Nb(110)

Поверхность Nb-O/Nb(110): состав и химические состояния ниобия и кислорода

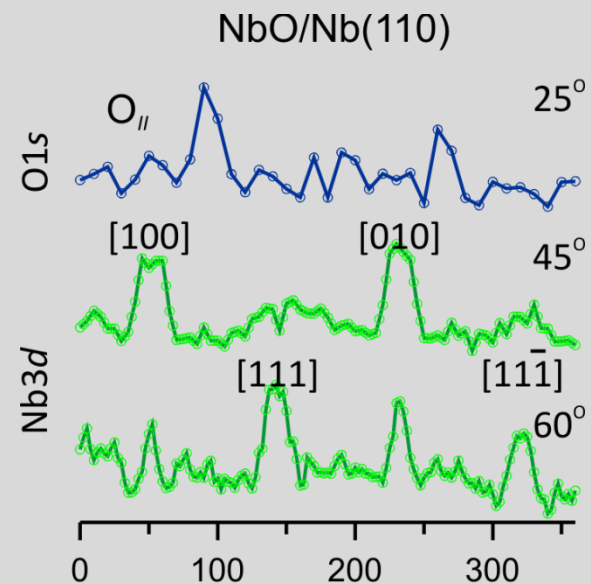
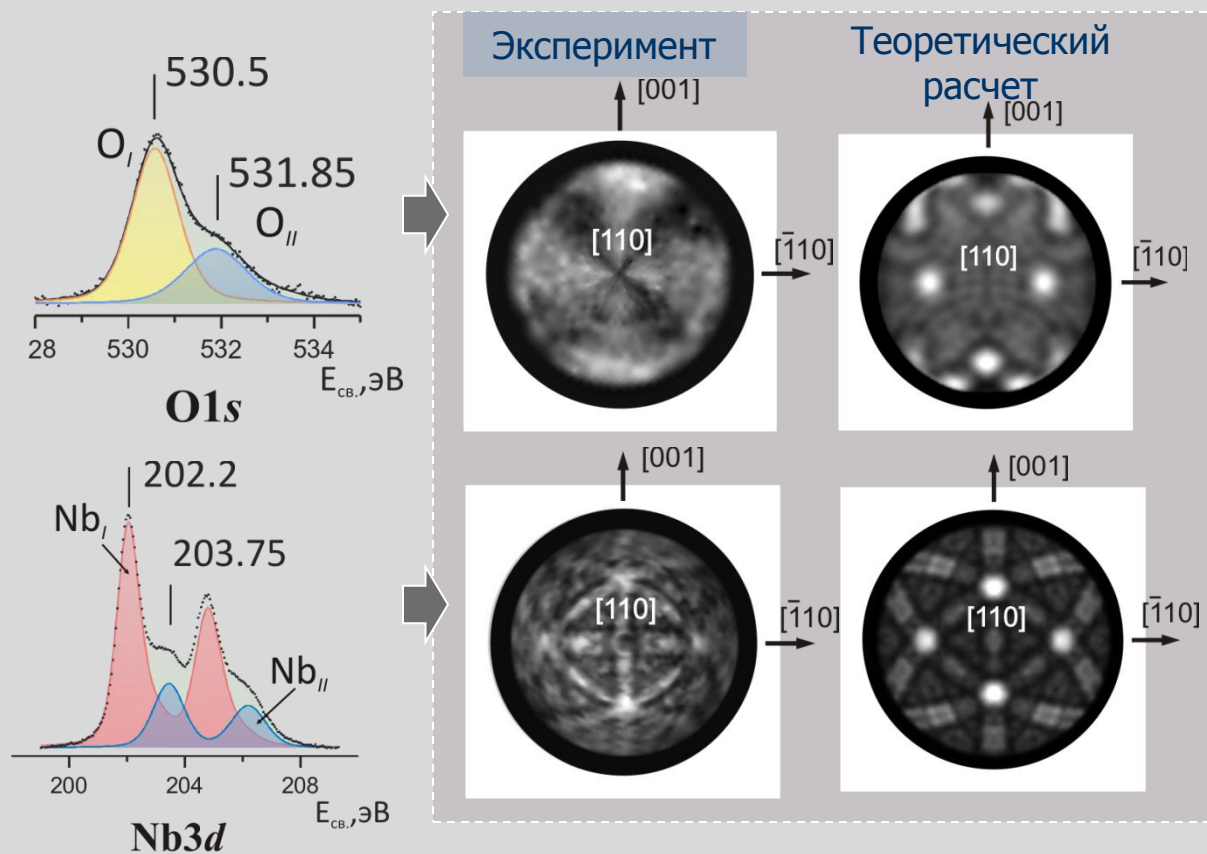
Обзорный спектр поверхности Nb-O/Nb(110)



Установлено

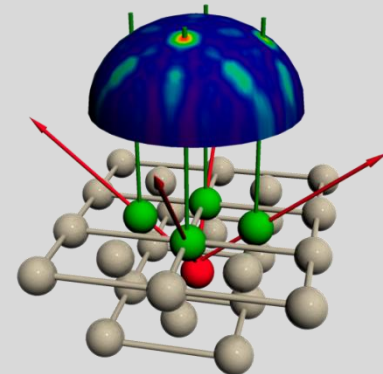
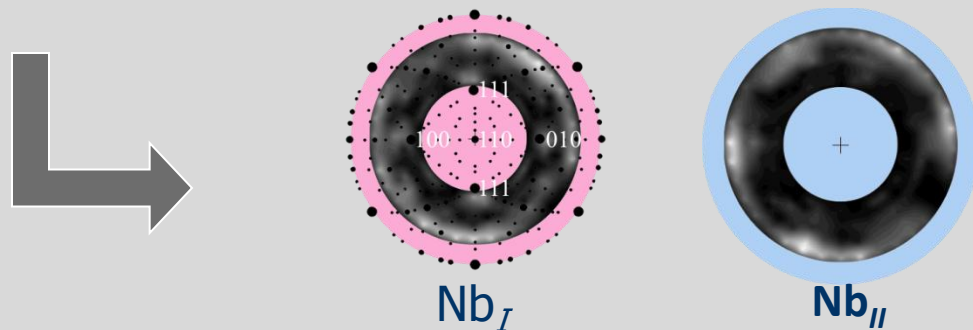
химическая форма ниобия и два химически неэквивалентных состояния кислорода на поверхности Nb-O/Nb(110)

Рентгеновская фотоэлектронная дифракция на поверхности Nb-O/Nb(110)



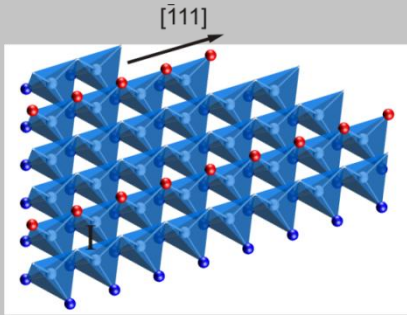
Анализ азимутальной угловой зависимости O_{1s} -линии

Разделение состояний Nb_I и Nb_{II} в Nb_{3d}

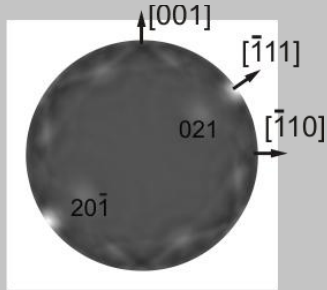


Теоретическое моделирование РФД поверхности Nb-O/Nb(110)

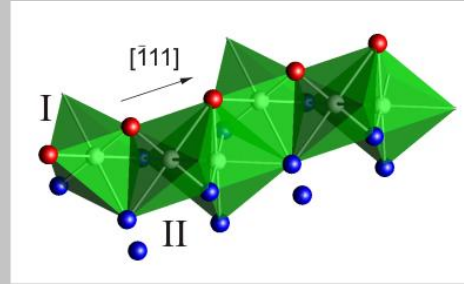
Модель



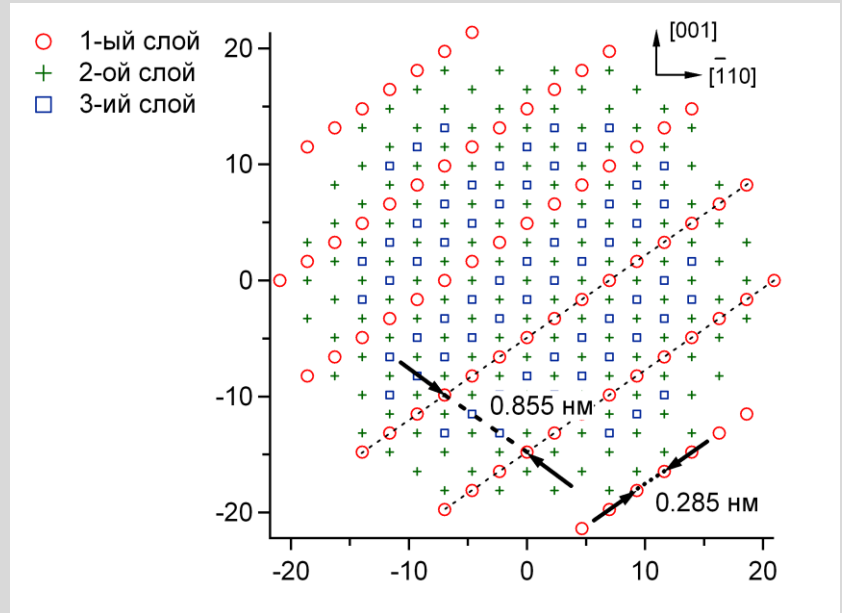
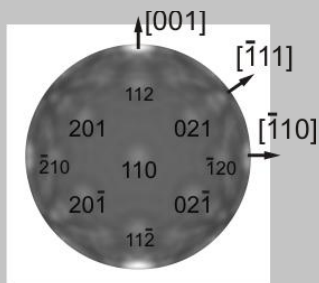
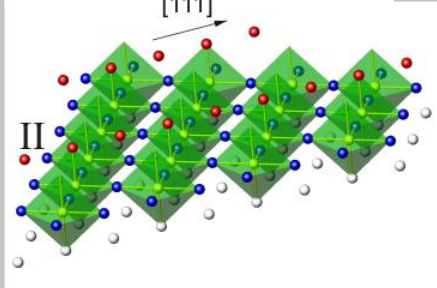
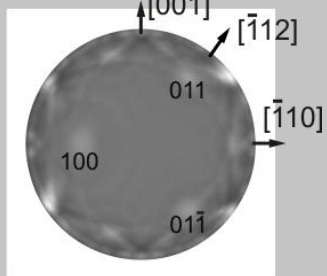
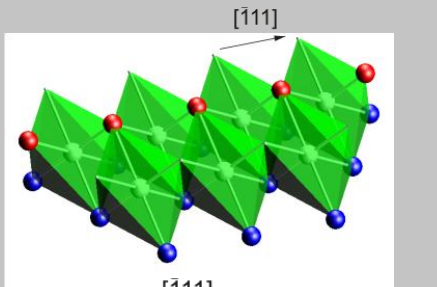
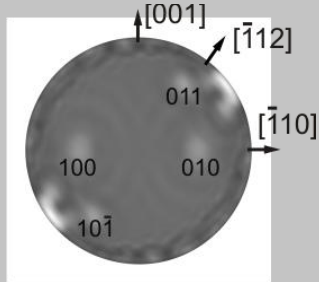
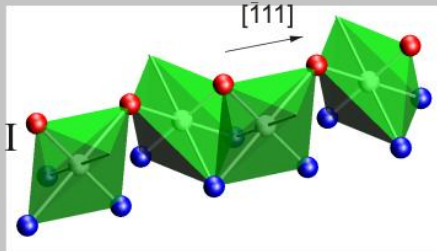
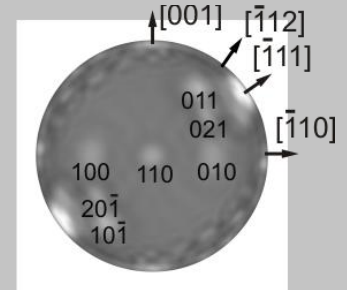
2p-картина O1s-электронов



Модель



2p-картина O1s-электронов

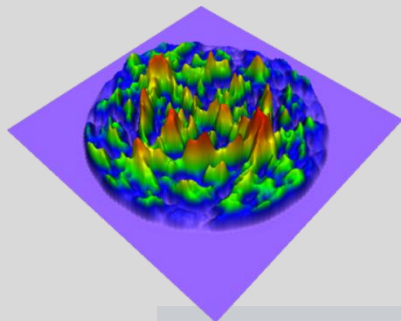


Используемый в расчетах кластер Nb(110)

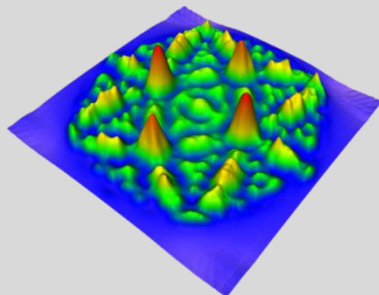


Квазипериодические Nb-O-структуры на поверхности Nb(110)

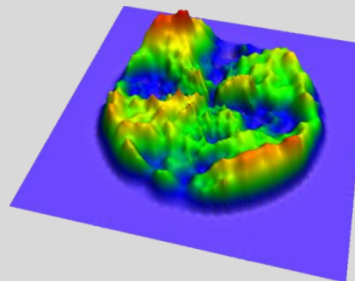
Эксперимент
XPD Nb3d



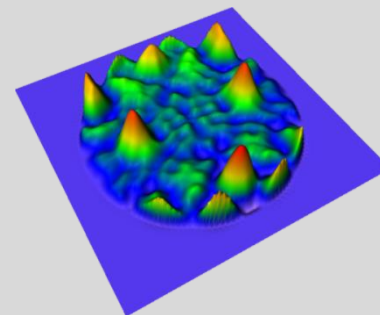
ssc-sw модель
Nb3d



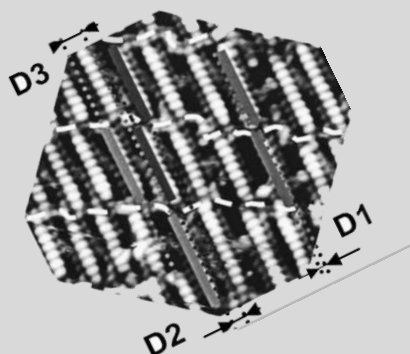
Эксперимент XPD O1s



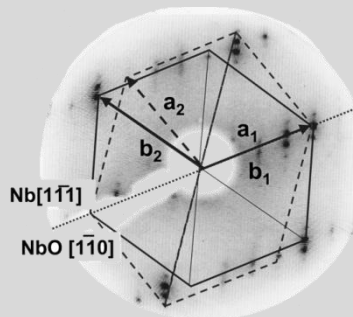
ssc-sw модель O1s



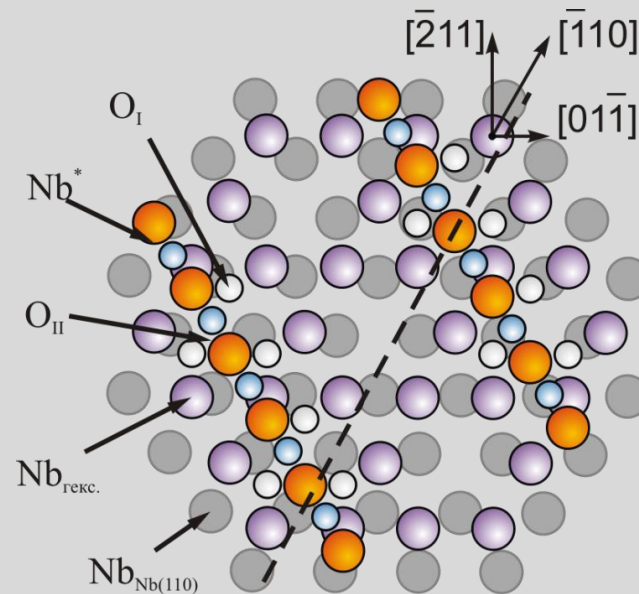
Фотоэлектронная дифракция поверхности Nb-O/Nb(110)



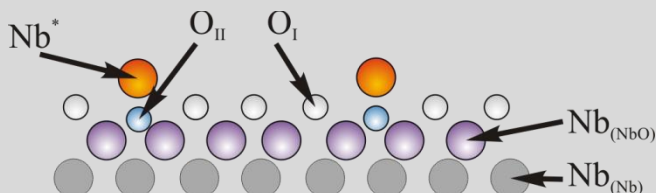
ДМЭ-исследование
Nb-O/Nb(110)*



СТМ-изображение
Nb-O/Nb(110)**



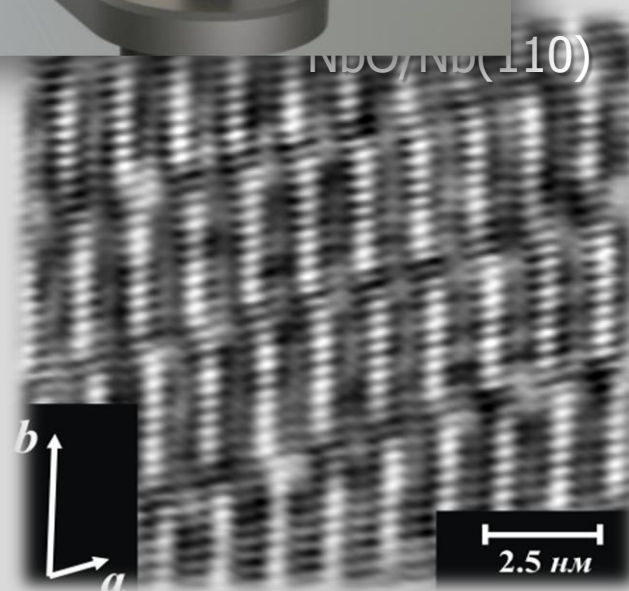
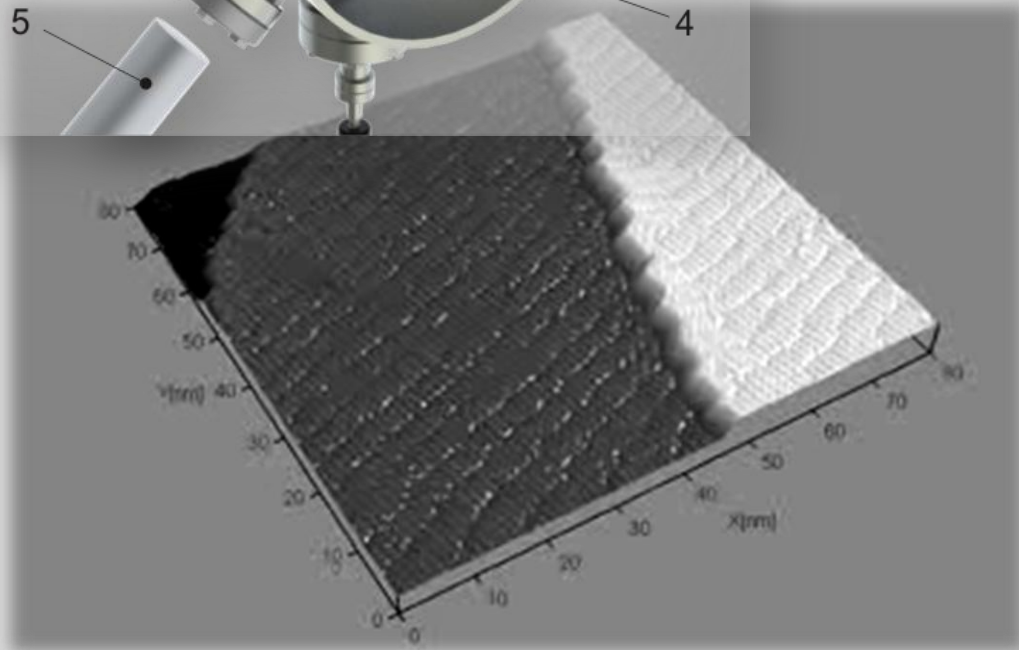
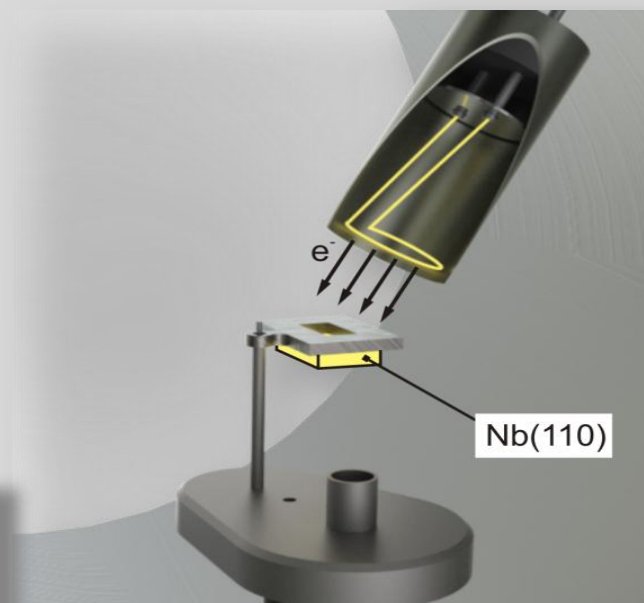
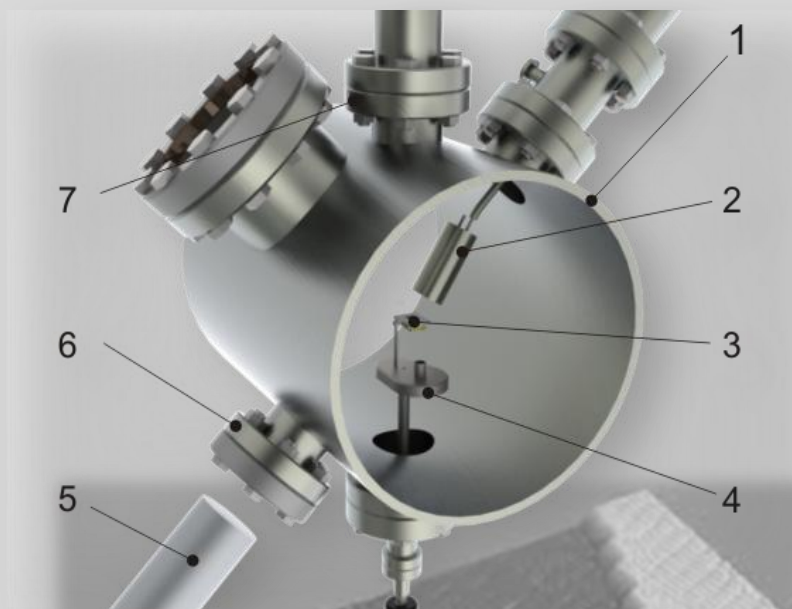
Модель структуры поверхностного слоя
Nb-O/Nb(110)



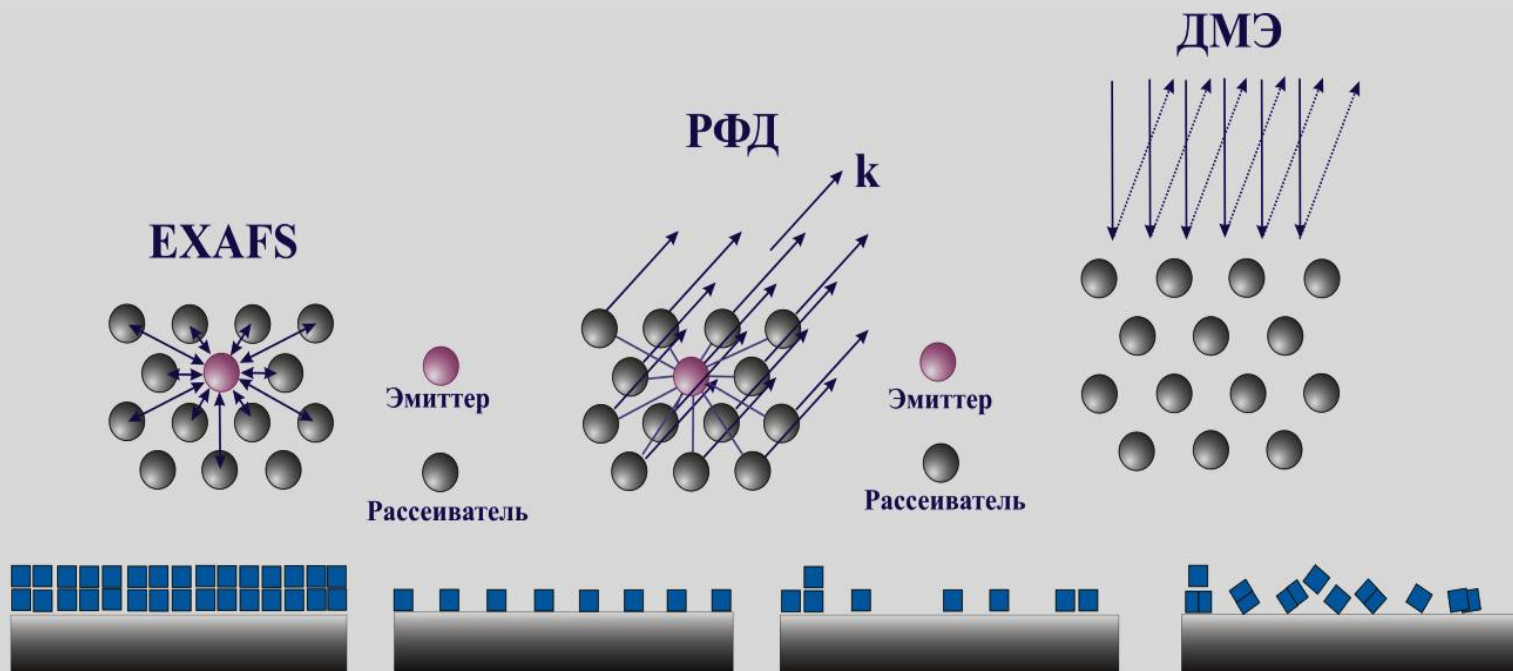
* I. Arfaoui. Tiling of a Nb(110) surface with NbO crystals nanosized by the NbO Nb misfit. Physical review B, Vol. 65 (2002)

** I. Arfaoui et.al., Surf.Sci., V.557, P. 119 (2004)

Оксидные наноструктуры на поверхности ниобия (110): Исследование методами РФЭС, РФД и СТМ



Возможности метода Фотоэлектронной Дифракции и Голографии при изучении структуры твердых тел



EXAFS	Да	Да	Да	Да
РФД	Да	Да	Да	Нет
ДМЭ	Да	Да	Нет	Нет



ЦКП УрО РАН “Электронная спектроскопия и СТМ-микроскопия поверхности”