

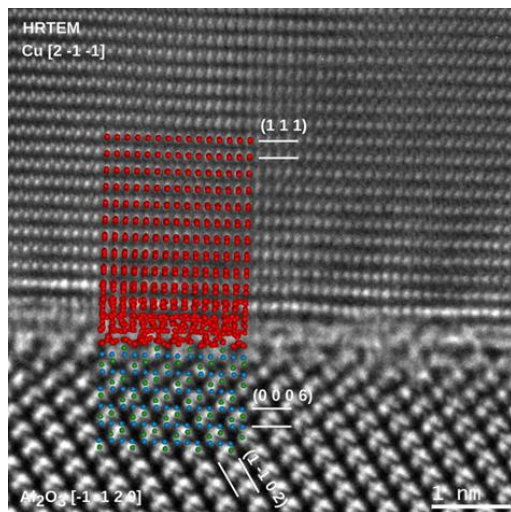
SEMINARIUM RENTGENOWSKIE

Dnia 18.03.2014r. o godz. 10.30, w Sali D Instytutu Fizyki PAN, odbędzie się seminarium, na którym **dr inż. Kinga Nalepka** z Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie, wygłosi referat na temat:

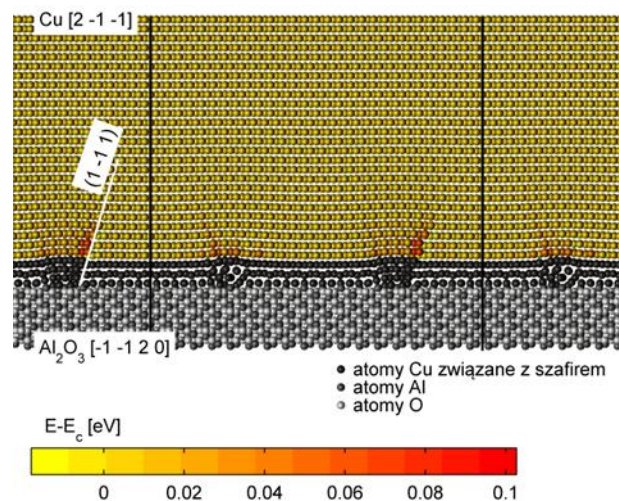
"Rekonstrukcja warstw przejściowych metal/ ceramika zarejestrowanych na obrazach HRTEM"

Streszczenie:

Odtworzono mikrostrukturę interfejsu nanokompozytu $\text{Cu}/(0\ 0\ 0\ 1)\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ otrzymanego metodą ablacji laserowej (Pulsed Laser Deposition: PLD) (Rys.1). Badania metodami Cs-HRTEM (aberration-corrected high-resolution transmission electron microscopy) oraz EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction) pokazały, że miedź tworzy wypy (typ wzrostu Volmera-Webera), które przyjmują jedną główną orientację względem podłoża szafirowego $(1\ 1\ 1)[2\ -1\ -1]\text{Cu}|| (0\ 0\ 1)[-1\ -1\ 2\ 0]\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Silne wiązanie pomiędzy fazami powoduje zmiany strukturalne w warstwie $(1\ 1\ 1)\text{Cu}$ najbliższej $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ i prowadzi do powstania układu częściowo zdysocjowanych dyslokacji w warstwie następnej. W rezultacie heterostruktura staje się układem półkoherentnym. Obszary sieciowego dopasowania poszczególnych warstw miedzi obniżają się w kierunku szafiru, co wywołuje duże deformacje w płaszczyznach najgęstszej upakowania (Rys.2). Otrzymana rekonstrukcja odwzorowuje kluczowe cechy wytworzonej warstwy przejściowej $\text{Cu}/(0\ 0\ 0\ 1)\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Potwierdzenie stanowi dobra zgodność między symulacją obrazu HRTEM wykonaną dla utworzonego modelu i eksperymentalną mikrografią. Rekonstrukcję otrzymano metodą dynamiki molekularnej (MD) przyjmując, że szafir pozostaje sztywny, natomiast deformacje w miedzi określa potencjał międzyatomowy Voter. Referat zakończony zostanie prezentacją nowego podejścia do opisu wiązania w warstwie przejściowej. Proponowaną metodę sformułowano w ramach modelu Charge Transfer Ionic Potential + Embedded Atom Method (CTIP+EAM), co pozwala uwzględnić deformacje w warstwie ceramiki.



Rys. 1 Atomowa rekonstrukcja (atomy Cu, Al i O oznaczone są odpowiednio czerwonymi, zielonymi i niebieskimi sferami).



Rys.2 Rozkład zmiany energii przypadającej na atom względem stanu równowagi w wycinku miedzi o grubości 8\AA przechodzący przez środek komórki periodycznej.