

ESTRUCTURA DE PELÍCULAS DELGADAS DE LA ALEACIÓN ORDENADA CuAu I

G. Baitelman y R. Zimmerman

Laboratorio de Películas Delgadas, Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires.
Paseo Colón 850 (1063) Buenos Aires.

Se estudió por difracción de electrones la estructura de películas epitaxiales de la aleación CuAu I en orientación (001). Se depositaron películas monocristalinas de CuAu 50:50 por evaporación en vacío y se obtuvo la aleación ordenada CuAu I por calentamiento durante una hora a 350 °C. El ordenamiento transforma la estructura cúbica en tetragonal y se caracteriza por la formación de maclas cuya presencia produce un diagrama de difracción complejo. Para indexar el diagrama experimental se calculó el plano recíproco (001) aplicando un método computacional. Además de las reflexiones de la superred tetragonal se identificaron reflexiones correspondientes a maclas según los planos (101) y de doble difracción entre la orientación original y las maclas.

I. INTRODUCCIÓN

Los metales puros tienen muchas aplicaciones en ingeniería pero con frecuencia cuando se requieren mejores propiedades físicas se utilizan aleaciones de dos o más metales o de metales con compuestos no metálicos.

Cuando se tiene una aleación de dos componentes, los átomos de uno de ellos pueden ser considerados como impurezas dentro de la red cristalográfica del otro y esa irregularidad introduce modificaciones en las propiedades físicas¹⁻³.

Un caso de muy particular interés es el de las aleaciones ordenadas que sólo pueden obtenerse a partir de metales de solubilidad ilimitada y con una estructura cristalográfica de tipo sustitucional.

En la mayor parte de las soluciones sólidas sustitucionales las dos clases de átomos A y B están ubicadas al azar en la red cristalina pero hay algunos casos para los cuales esto es cierto sólo a temperaturas elevadas. Cuando se enfrían por debajo de una cierta temperatura crítica, los átomos de A se ubican de una manera periódica en un conjunto de puntos de la red cristalográfica y los de B en otro. Se dice entonces que la aleación se ha ordenado y se forma una nueva estructura cristalina que se denomina superred⁴⁻⁷.

La formación de la superred está acompañada por cambios en las propiedades físicas: la aleación CuAu 50:50 cuando está desordenada es dura y quebradiza, mientras que cuando se ordena en una estructura de superred es blanda y dúctil; de la misma manera la resistividad eléctrica toma un valor considerablemente menor cuando la aleación se or-

dena⁸.

La existencia del ordenamiento puede inferirse a partir del cambio de las propiedades físicas pero la evidencia más concluyente es el cambio en el diagrama de difracción⁹.

El objetivo de este trabajo es el estudio por difracción de electrones de la transformación orden-desorden de películas delgadas monocristalinas de la aleación CuAu 50:50.

II. MACLAS EN LA ALEACIÓN CuAu I

La aleación CuAu desordenada tiene estructura cristalográfica *fcc*. Cuando se calienta entre 270 °C y 350 °C los planos (002) son ocupados alternadamente por átomos de Au y Cu con lo que la estructura *fcc* se transforma en tetragonal.

La segregación de átomos de Cu y Au en planos alternados (002) produce una ligera contracción del eje *c* relativa al eje *a* producida por la diferencia de tamaño de los átomos de Au y Cu. Debido a esa contracción se producen tensiones durante el ordenamiento. El sistema trata de eliminar estas tensiones a través del maclado de la fase ordenada.

El maclado se produce según planos que no contienen la dirección de las tensiones. En el caso del CuAu I se produce según planos {101} de la estructura desordenada. La formación de las maclas trae como consecuencia la aparición de reflexiones adicionales en el diagrama de difracción. Para la indexación de las mismas se procedió a calcular el plano recíproco (001) del CuAu I conteniendo reflexiones de la red original y reflexiones de macla.

III. PARTE EXPERIMENTAL

Sobre caras de clivaje de monocristales de CINA mantenidas a 270 °C se depositó por evaporación en vacío una película epitaxial (001) de Au de aproximadamente 300 Å.

Luego de disolver el CINA se montó la película de Au sobre grillas de Pd y se evaporó sobre las mismas la cantidad de Cu requerida para obtener una aleación equimolecular. Durante la evaporación las grillas se mantuvieron a 200 °C para que la película de Cu sea monocristalina. Finalmente las muestras se calentaron durante 1 hora a 350 °C para producir la homogeneización y el ordenamiento. Algunas muestras fueron calentadas durante 120 minutos.

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las reflexiones de macla pueden ser calculadas rotando 180° la red recíproca original alrededor de los posibles ejes de macla que en este caso pertenecen a la familia $\langle 101 \rangle^{10-11}$.

Las matrices de rotación aplicadas son:

$$R = 1/(1+r^2) \begin{bmatrix} -[1+r^2] & 0 & 0 \\ 0 & [r^2-1] & \pm 2r \\ 0 & \pm 2r & [1-r^2] \end{bmatrix}$$

para los ejes de macla $[011]$ y $[0\bar{1}1]$,

$$R = 1/(1+r^2) \begin{bmatrix} [r^2-1] & 0 & \pm 2r \\ 0 & [1+r^2] & 0 \\ \pm 2r & 0 & [1-r^2] \end{bmatrix}$$

para los ejes de macla $[101]$ y $[\bar{1}01]$.

La red recíproca es el resultado de la superposición de la red original y las correspondientes a las cuatro orientaciones posibles de macla.

Para dibujar el plano (001), además de los puntos de coordenada c igual a cero se tomaron todos aquellos comprendidos entre $-1/3$ y $+1/3$ debido a que el ondulado de la película permite que puntos inmediatamente próximos al plano (001) sean también visibles. En la Fig. 2 se muestra el plano recíproco calculado que es esencialmente el mismo

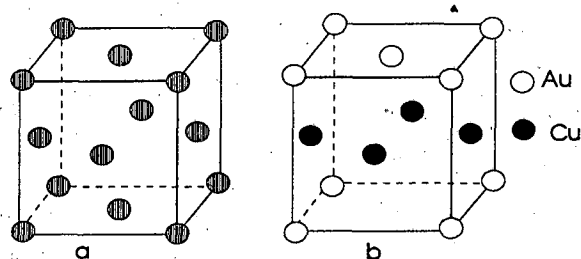


Fig. 1: Celda unitaria de a) CuAu desordenado, b) CuAu ordenado.

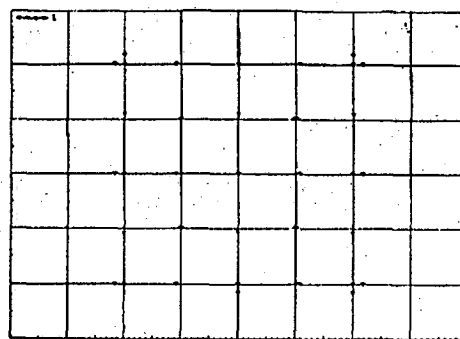


Fig. 2: Plano recíproco (001) de CuAu I con reflexiones de la orientación fundamental de maclas.

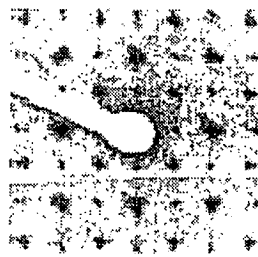


Fig. 3: Diagrama de difracción CuAu I (001), calentado 1 hora.

que el obtenido experimentalmente (Fig. 3).

Algunas muestras calentadas por un período más largo (120 minutos) mostraron además de las reflexiones originales y de macla, reflexiones adicionales que fueron atribuidas al mecanismo de doble difracción. Haces difractados por planos de la orientación original pueden redifractarse a través de un

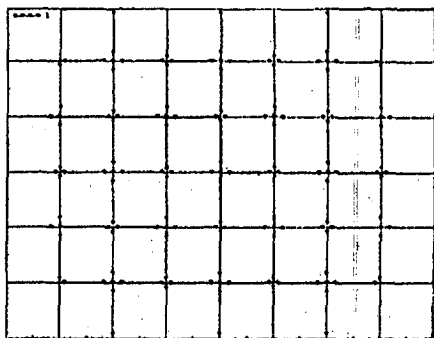


Fig. 4: Plano recíproco (001) de CuAu I con reflexiones de la orientación fundamental, de maclas y de doble difracción.

segundo conjunto de planos de macla produciendo nuevas reflexiones. En este caso los puntos de la red recíproca correspondientes al mecanismo de doble difracción se calculan sumando las coordenadas de los puntos de la orientación original y de macla. Como haces primarios sólo deben considerarse aquellas reflexiones que están en el plano recíproco (001), siendo indistinto que provengan de la orientación original y se redifracten en planos de macla o viceversa. En la Fig. 4 se muestra el dibujo del plano recíproco calculado teniendo en cuenta la matriz original, las maclas y las reflexiones de doble difracción.

La Fig. 5 muestra el diagrama de difracción obtenido experimentalmente que coincide con el plano recíproco calculado.

REFERENCIAS

1. Ed. B. Chalmers, *Progress in Metal Physics* Vol. 3, Pergamon Press Ltd. London (1950) Chap. I.

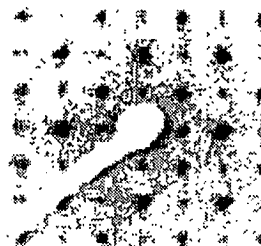


Fig. 5: Diagrama de difracción CuAu I (001), calentado 2 horas.

2. L. I. Maissel en *Handbook of Thin Film Technology*, McGraw-Hill Book Co. (1970) Chap. XIII.
3. S. Maruyama, *Thin Solid Films* **91**, 139 (1982).
4. B. D. Cullity. *Elements of X-Ray Diffraction*, Addison-Wesley Publishing Company (1967) Chaps. XII, XIII.
5. M. Ueda and H. Nakano, *J. Phys. Soc. Japan* Vol. 52 N°6, 2081 (1983).
6. R. Ramírez, A. R. Rahman & F. Schuller. *Phys. Rev. B* Vol. 30 N°30, 6208 (1984).
7. R. Zimmerman and E. Broitman, *Thin Solid Films*, **191**, 275 (1990).
8. W. Hume-Rothery. *The structure of metals and alloys*, Chemical Publishing Company USA (1939) Chap. IV.
9. A. B. Glossop and D. W. Pashley, *Proc. R. Soc. London Ser A250*, 132 (1959).
10. R. Bullough & C. M. Wayman, *Trans. Metall. Soc. AIME* **236**, 1704 (1966).
11. C. M. Wayman & R. Bullough, *Trans. Metall. Soc. AIME* **236**, 1711 (1966).