

# Моделирование процесса образования вакансий при сканировании поверхности Cu(100)

С. В. Колесников<sup>1)</sup>, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 марта 2009 г.

Методом молекулярной динамики исследованы основные механизмы образования вакансий в первом слое поверхности Cu(100). Показано, что в результате взаимодействия иглы сканирующего туннельного микроскопа с поверхностью интенсивность образования поверхностных вакансий может увеличиться в  $10^3$ - $10^5$  раз. Основываясь на проведенных исследованиях, мы предлагаем эффективный метод настройки концентрации вакансий в первом слое поверхности Cu(100), не связанный с изменением температуры системы.

PACS: 61.46.—w, 68.47.De

Изучение физических свойств поверхностей металлов приобрело в последнее время повышенный интерес в связи с развитием нанотехнологий и перспективами создания нанокomпьютеров. При этом изучение свойств поверхности Cu(100) особенно перспективно с этой точки зрения в силу ряда обстоятельств. Во-первых, в процессе эпитаксиального роста тонких пленок Co на такой поверхности образуются стабильные кластеры [1], во-вторых, эти кластеры обладают большим магнитным моментом и могут быть использованы в качестве носителей информации [2].

Стабильные магнитные структуры из атомов примеси можно создавать не только на поверхности, но и в первом слое поверхности Cu(100). Имеются многочисленные примеры создания таких структур с использованием сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) [3, 4]. Как было ранее показано авторами [5], основной механизм движения атомов, погруженных в первый слой поверхности меди, связан с наличием поверхностных вакансий. Механизмы формирования, а также физические свойства поверхностных вакансий изучены в ряде теоретических работ [6, 7].

Концентрация свободных поверхностных вакансий является важным параметром, влияющим на скорость диффузии погруженных атомов и, следовательно, на время формирования структур из погруженных атомов примеси. Очевидно, что концентрация поверхностных вакансий связана в первую очередь с температурой подложки. Однако если по тем или иным причинам изменение температуры в системе нежелательно, то необходимо иметь в распоряжении

методы увеличения концентрации поверхностных вакансий, не связанные с нагреванием подложки.

В экспериментах по исследованию поверхностных свойств металлов изучаемая поверхность никогда не бывает идеально ровной: она всегда оказывается ступенчатой. Именно вблизи таких ступеней поверхностные вакансии образуются наиболее интенсивно. Ниже мы покажем, что процесс образования вакансий можно сделать еще интенсивнее, если регулярно сканировать поверхность в области ступени с помощью СТМ.

Для нахождения диффузионных барьеров для событий, связанных с образованием поверхностных вакансий, использован метод молекулярной динамики (МД). При этом атомы меди можно рассматривать как классические частицы, и потенциальную энергию системы можно задать следующим образом [8]:

$$E_C = \sum_i (E_R^i + E_B^i), \quad (1)$$

$$E_B^i = - \left\{ \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[ -2q_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

$$E_R^i = \sum_j \left[ A_{\alpha\beta}^1 \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) + A_{\alpha\beta}^0 \right] \exp \left[ -p_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right], \quad (3)$$

где  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  – типы атомов,  $r_0^{\alpha\beta}$ ,  $A_{\alpha\beta}^0$ ,  $A_{\alpha\beta}^1$ ,  $\xi_{\alpha\beta}$ ,  $p_{\alpha\beta}$ ,  $q_{\alpha\beta}$  – параметры межатомного взаимодействия, зависящие от свойств металлов, входящих в систему. Для расчетов мы использовали параметры межатомного взаимодействия, представленные в работе [9].

<sup>1)</sup>e-mail: kolesnikov\_s\_v@mail.ru

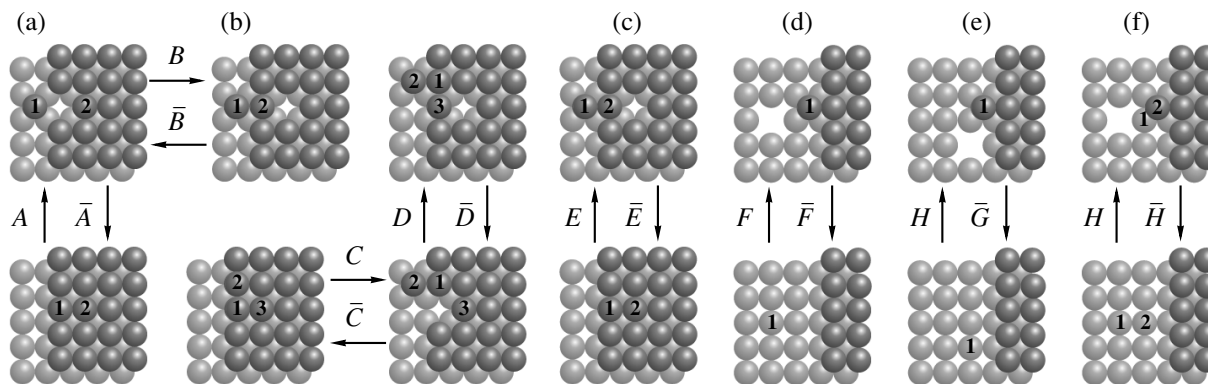


Рис.1. Основные механизмы формирования вакансий возле ступени на поверхности Cu(100): (a)–(c) формирование поверхностных вакансий на верхней части ступени; (d)–(f) формирование поверхностных вакансий на нижней части ступени

После нахождения диффузионного барьера время ожидания интересующего нас события можно оценить по формуле

$$\tau_i = \nu_0^{-1} \exp\left(\frac{E_i^D}{kT}\right), \quad (4)$$

где  $E_i^D$  – диффузионный барьер, рассчитанный методом МД,  $\nu_0 = 10^{12}$  Гц [10] – частотный префактор,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура медной подложки.

Рассмотрим теперь основные события, приводящие к образованию вакансий на верхней и нижней частях ступени на поверхности Cu(100). Три наиболее вероятных механизма образования вакансий на верхней части ступени изображены на рис.1a–c, значения для соответствующих диффузионных барьеров в отсутствие СТМ иглы приведены в таблице. Здесь

**События, связанные с формированием вакансий возле ступени на поверхности Cu(100)**

Событие	Диффузионный барьер, eV	Событие	Диффузионный барьер, eV
A	0.844	$\bar{A}$	0.010
B	0.333	$\bar{B}$	0.304
C	1.047	$\bar{C}$	0.489
D	0.410	$\bar{D}$	0.158
E	0.983	$\bar{E}$	0.200
F	1.636	$\bar{F}$	0.856
G	1.096	$\bar{G}$	0.309
H	1.195	$\bar{H}$	0.417

стоит обратить внимание на схожесть событий, изображенных на рис.1a и c: разница между ними состоит лишь в том, что одно и то же событие может происходить либо в один этап (диффузия димера (E)),

либо в два этапа (последовательные прыжки атомов (A) и (B)). Поскольку диффузионные барьеры для событий ( $\bar{A}$ ) и (B) существенно меньше, чем для событий (A) и (E), промежуточное состояние, изображенное на рис.1a, можно считать метастабильным (поскольку атом находится в этом состоянии значительно меньше времени, чем в начальном или конечном состояниях).

Кратко рассмотрим, как наличие метастабильного состояния влияет на среднее время образования вакансий. При температуре медной подложки 300 К и отсутствии СТМ иглы время образования вакансии составляет  $3.15 \cdot 10^4$  с в случае отсутствия (c) метастабильного состояния. При наличии же метастабильного состояния (a) время образования вакансии увеличивается до  $3.75 \cdot 10^5$  с. Это связано с тем, что диффузионный барьер для события ( $\bar{A}$ ) значительно меньше, чем для события (B), и атом Cu, оказавшись в таком метастабильном состоянии, с большой вероятностью “сваливается” в начальное состояние. Таким образом, наличие метастабильного состояния уменьшает вклад данного события в процесс образования вакансий. Поэтому ниже мы не будем учитывать наличия подобных метастабильных состояний, которые могут появляться в цепочках событий, изображенных на рис.1, а также метастабильных состояний, возникающих при приближении СТМ иглы к поверхности.

На рис.1d–f изображены события, приводящие к образованию поверхностных вакансий на нижней части ступени на поверхности Cu(100); диффузионные барьеры для этих событий приведены в таблице. Заметим сразу, что диффузионные барьеры для событий, изображенных на рис.1d–f, существенно больше,

чем для событий, изображенных на рис.1а–с, таким образом, поверхностные вакансии формируются интенсивнее на верхней части ступени.

Рассмотрим теперь, как меняются диффузионные барьеры для событий в присутствии СТМ иглы. Отметим, что поскольку в процессе сканирования поверхности меди часть атомов с подложки переходит на кончик СТМ иглы, то вне зависимости от того, из какого металла была изначально сделана СТМ игла, ее кончик через некоторое время (обычно в процессе настройки СТМ) “обрастает” атомами подложки. При этом кончик СТМ иглы обладает одной характерной особенностью [11], а именно, непосредственно на кончике СТМ иглы оказывается только один атом, через который и осуществляется процесс сканирования. При этом расположение остальных атомов на кончике СТМ иглы не оказывает сильного влияния ни на получаемое СТМ изображение, ни на диффузионные барьеры происходящих под иглой событий. Поэтому в нашей работе мы моделируем СТМ иглу в виде правильной пирамиды из 30 атомов Cu, как изображено на рис.2а.

На рис.2б, в качестве примера, показано, как меняется диффузионный барьер для диффузии димера (рис.1с) в зависимости от положения кончика СТМ иглы относительно конечного положения одного из двух атомов, совершающих “прыжок” (см. рис.2а). Видно, что в зависимости от положения СТМ иглы диффузионный барьер для данного процесса может как увеличиваться, так и уменьшаться. Наибольшее уменьшение диффузионного барьера происходит, когда СТМ игла находится практически над конечным положением атома. Как видно из рис.2б, диффузионный барьер можно уменьшить почти на 0.3 эВ при приближении СТМ иглы к поверхности Cu(100) на расстояние 3.2 Å. Однако дальнейшее уменьшение диффузионного барьера затруднительно, поскольку при приближении к поверхности менее чем на 3.0 Å СТМ игла заходит в зону отталкивания, и диффузионный барьер начинает увеличиваться. Заметим, что когда СТМ игла находится в зоне отталкивания поверхности, процесс сканирования становится непредсказуемым, поскольку возрастает вероятность существенного изменения формы СТМ иглы в результате взаимодействия с поверхностью. По этим причинам, мы рассматриваем взаимодействие СТМ иглы с поверхностью подложки только в зоне притяжения.

Аналогично описанному выше событию (рис.1с) методом МД были рассчитаны изменения диффузионных барьеров для остальных событий, изображенных на рис.1, при приближении СТМ иглы к по-

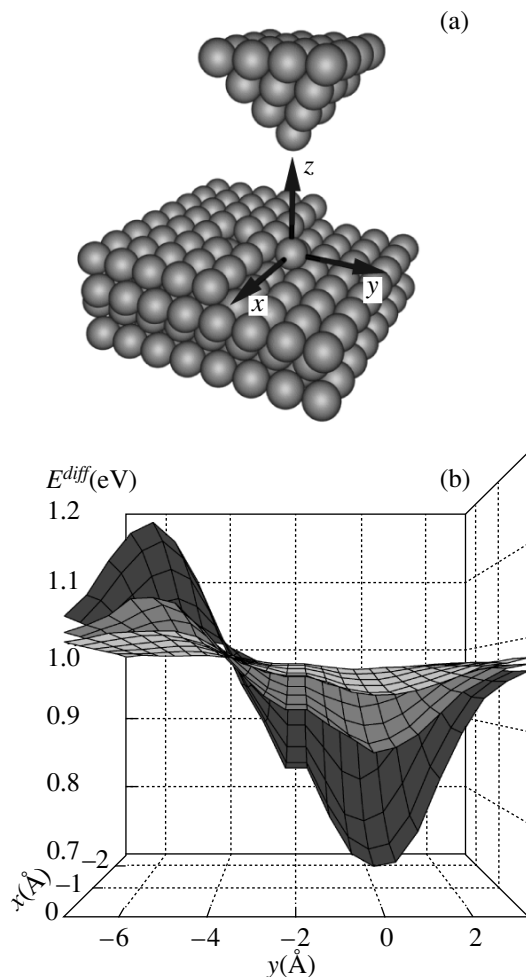


Рис.2. Влияние иглы СТМ на диффузию димера: (а) конечная конфигурация системы после диффузии димера в присутствии СТМ иглы; (б) зависимость диффузионного барьера от положения кончика СТМ иглы. Темно-серая поверхность на графике (б) соответствует расстоянию 3.2 Å между СТМ иглой и медной подложкой, серая поверхность – 3.6 Å, светло-серая – 4.0 Å

верхности Cu(100). Согласно этим вычислениям, мы нашли минимальные времена образования вакансий как на верхней, так и на нижней частях ступени. На рис.3 показано, как меняется время образования вакансий в зависимости от расстояния между СТМ иглой и поверхностью подложки при различных температурах. Как видно из рисунка, время образования поверхностных вакансий на верхней части ступени убывает при приближении СТМ иглы быстрее, чем время образования вакансий на нижней части ступени. Таким образом, разница в интенсивности образования вакансий на различных частях ступени становится еще более заметной. Обратим внимание на то, что взаимодействие СТМ иглы с поверхностью

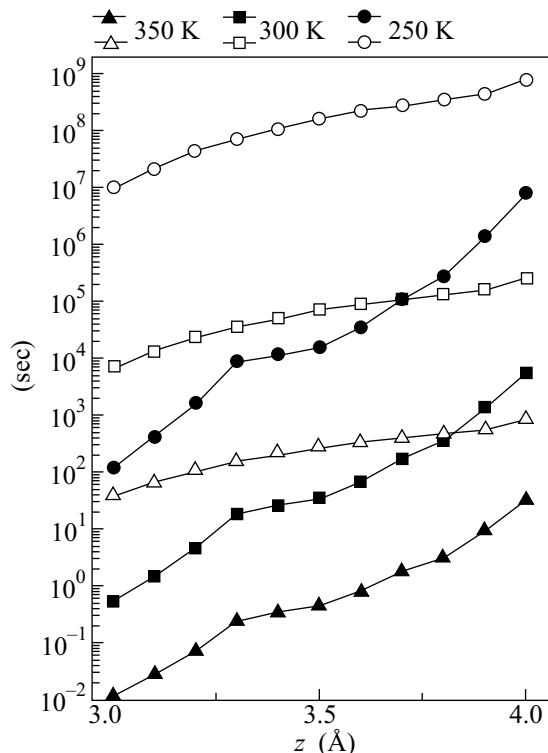


Рис.3. Зависимость среднего времени образования поверхностных вакансий от расстояния между поверхностью Cu(100) и СТМ иглой при различных температурах. Светлые точки на графике соответствуют среднему времени образования вакансий на нижней части ступени, черные точки – на верхней части ступени

подложки оказывает существенное влияние на время образования поверхностных вакансий, сравнимое с изменением температуры на 50 К.

Итак, мы получили следующие результаты. Во-первых, используя СТМ, можно увеличить интенсивность образования вакансий на ступенчатой по-

верхности Cu(100) в  $10^3$ – $10^5$  раз, что эквивалентно увеличению температуры подложки на 50 К. Во-вторых, поверхностные вакансии образуются значительно интенсивнее на верхней части ступени. Таким образом, сканирование верхней части ступени является эффективным способом настройки концентрации поверхностных вакансий при фиксированной температуре.

При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

1. U. Ramsperger, A. Vaterlaus, P. Pfäffli et al., *Phys. Rev. B* **53**, 8001 (1996).
2. P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese et al., *Science* **16**, 1130 (2003).
3. M. L. Grant, B. S. Swartzentruber, N. C. Bartelt, and J. B. Hannon, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4588 (2001).
4. O. Kurnosikov, J. T. Kohlhepp, and W. J. M. de Jonge, *Europhys. Lett.* **64**, 77 (2003).
5. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, *Phys. Rev. B* **79**, 115433 (2009).
6. C. Boisvert and L. J. Lewis, *Phys. Rev. B* **56**, 7643 (1997).
7. F. Montalenti, A. F. Voter, and R. Ferrando, *Phys. Rev. B* **66**, 205404 (2002).
8. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
9. V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk, L. Niebergall et al., *Phase Transitions* **78**, 61 (2005).
10. A. Bogicevic, J. Strömquist, and B. I. Lundqvist, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 637 (1998).
11. В. Л. Миронов, *Основы сканирующей зондовой микроскопии*, М.: Техносфера, 2005.