

Исследование механических свойств палладиевых наноконтактов методом молекулярной динамики

А. Л. Клавсюк¹⁾, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий

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

Поступила в редакцию 9 декабря 2009 г.

После переработки 12 января 2010 г.

Методом молекулярной динамики были исследованы механические свойства палладиевых наноконтактов при их растяжении. Определены наиболее характерные межатомные расстояния в контактах и исследован процесс образования атомных контактов палладия при разрыве с учетом различной ориентации (100), (110), (111) границ раздела "контакт-поверхность".

В последнее время появилось большое количество работ, посвященных экспериментальным и теоретическим исследованиям металлических наноконтактов [1–6]. Исследования свойств наноконтактов необходимы не только для фундаментальной физики, но и для практического применения. Наиболее интересной задачей является получение металлических наноконтактов с контролируруемыми электронными и магнитными свойствами и их использование в устройствах записи, хранения и обработки информации, а также в качестве высокочувствительных магнитных сенсоров. В настоящее время металлические наноконтакты экспериментально могут быть получены следующими методами: с помощью иглы сканирующего туннельного микроскопа [1], техники механически управляемого разрыва [2] или электрохимическим методом [3].

Одним из наиболее интересных элементов для создания и исследования свойств наноконтактов является палладий. Это связано с тем что, его структурные, электронные и магнитные свойства сильно зависят от таких параметров, как межатомное расстояние, температура, наличие примесей и дефектов [4, 5]. Например, в экспериментальной работе [6] были исследованы не только формирование атомного контакта из палладия, но и его магнитные свойства.

Главной целью данной работы было исследование механических свойств палладиевых контактов, а также определение возможности образования атомных наноконтактов Pd(100), Pd(110) и Pd(111) при разрыве.

Для этих целей был использован метод молекулярной динамики. Одним из ключевых вопросов при использовании этого метода является корректное описание межатомных взаимодействий. Исследование последних лет показали, что многочастичные меж-

атомные потенциалы, полученные в приближении сильной связи, позволяют хорошо описывать структурные свойства различных наноструктур [4, 7, 8]. В этом приближении атомы палладия рассматриваются как классические частицы, а потенциальная энергия системы, состоящей из атомов палладия, задается следующим образом [9]:

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

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

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

где r_{ij} – расстояние между атомами i и j , α и β – типы атомов, $r_0^{\alpha\beta}$ – расстояние между атомами в массиве (ближайшие соседи), $q_{\alpha\beta}$ – параметр, описывающий затухание энергии притягивающего взаимодействия с расстоянием, $\xi_{\alpha\beta}$ – эффективный интеграл перескока метода сильной связи, $A_{\alpha\beta}^0$, $A_{\alpha\beta}^1$, $p_{\alpha\beta}$ – параметры межатомного взаимодействия, зависящие от свойств металлов, входящих в систему. Для расчетов мы использовали параметры межатомного взаимодействия, представленные в работе [9]. Уравнение движения для всех атомов решалось с использованием алгоритма Верлета [10].

При моделировании растяжения наноконтактов были использованы следующие условия. Во-первых, атомные контакты палладия были расположены между двумя поверхностями. Во-вторых, рассматривались два случая: цепочка из трех атомов и наноконтакт диаметром 10 Å. Для цепочки атомов первый

¹⁾ e-mail: klavsjuk@yandex.ru

атом контакта, ближайший к поверхности, находился в ГЦК узле, остальные атомы были расположены вдоль одной прямой. Во втором случае все атомы изначально находились в ГЦК узлах. Растяжение наноконтакта происходило посредством изменения расстояния между двумя поверхностями с шагом 0.1 \AA . Скорость растяжения контактов составляла 0.05 м/с . Каждая поверхность состояла из 8 слоев, два крайних слоя являлись статическими.

В большинстве экспериментов образуется контакт длиной два-четыре атома [1, 6], поэтому нами был смоделирован процесс разрыва трехатомного контакта палладия. Изменение силы упругости, возникающей в контакте при растяжении, изображено на рис.1. Значение силы упругости рассчитыва-

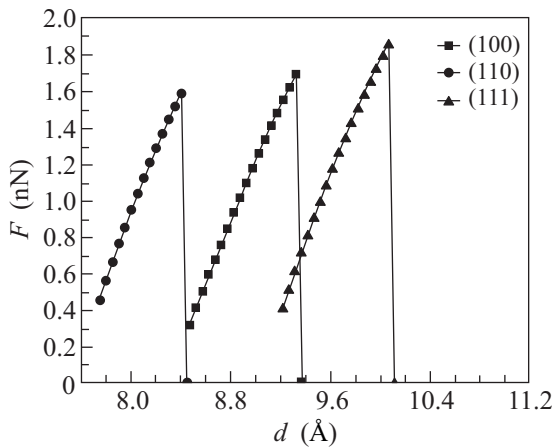


Рис.1. Изменение силы упругости, возникающей в трехатомном контакте палладия при растяжении с учетом разной ориентации (100), (110), (111) поверхности

лось как модуль частной производной потенциальной энергии по смещению. Как видно из рисунка, сила упругости растет линейно при увеличении расстояния между поверхностями, а в точке, соответствующей точке разрыва, резко уменьшается до нуля.

Для всех трех случаев ((100), (110) и (111)) углы наклона линейной части зависимости силы упругости от расстояния между поверхностями одинаковы (см. рис.1). Это свидетельствует о том, что ориентация поверхности не влияет на упругие свойства атомного контакта. Однако значения силы разрыва контакта и межатомного расстояния между крайним атомом и поверхностью сильно различаются (см. таблицу), это связано с разным координационным числом крайнего атома и, как следствие, разной энергией взаимодействия контакта с поверхностью. Сила разрыва наноконтакта, расположенного между поверхностями Pd(111) равна $1.87 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$, что почти

Трехатомный контакт			
Поверхность	(100)	(110)	(111)
$r_1, \text{ \AA}$	2.11	1.58	2.42
$r_2, \text{ \AA}$	2.62	2.63	2.60
$F \cdot 10^{-9}, \text{ Н}$	1.69	1.59	1.87
Бесконечная цепочка атомов			
$r_0, \text{ \AA}$	2.42		
$F \cdot 10^{-9}, \text{ Н}$	1.18		
Идеальный кристалл			
$r_0, \text{ \AA}$	2.78		
$F \cdot 10^{-9}, \text{ Н}$	0.57		

Примечание. Длина связи перед разрывом и сила разрыва трехатомного контакта палладия для разной ориентации поверхности ((100), (110), (111)), бесконечной цепочки и идеального кристалла. r_1 – расстояние от первого атома контакта до поверхности, r_2 – расстояние между центральным атомом и соседним в контакте, F – сила разрыва, r_0 – межатомное расстояние в идеальном кристалле и бесконечной цепочке.

в три раза больше силы разрыва связи в кристалле $0.57 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$. Отметим две особенности структурных свойств наноконтактов (см. таблицу). Во-первых, расстояния между атомами в контакте отличны от расстояний между атомами в идеальном кристалле; во-вторых, связь в наноконтакте более прочная, чем в идеальном кристалле.

Палладиевые контакты показали довольно высокую стабильность, разрыв наноконтактов происходил при температурах выше 200 К. Для поддержания постоянной температуры использовался метод перенормировки скоростей [10].

При растяжении контакта меняется и характер деформации поверхности. Если контакт находится в сжатом состоянии, поверхность принимает вогнутую форму. В дальнейшем с увеличением расстояния между поверхностями изменяется не только структура контакта, но и форма поверхности: сначала она становится более гладкой и лишь перед разрывом, когда контакт растянут, форма поверхности становится выпуклой.

Среди большинства методов образования атомных контактов наиболее простым является механически управляемый разрыв, в котором атомный контакт образуется вследствие разрыва тонкой проволоки. Поэтому исследование механических свойств и определение благоприятных условий формирования атомных контактов при растяжении более широких контактов (ширина контактов больше, чем один атом) является весьма актуальным. На рис.2 представлены результаты для растяжения палладиевого контакта диаметром 10 \AA . Как видно из рис.2, зависимость силы упругости, возникающей в контакте, от рассто-

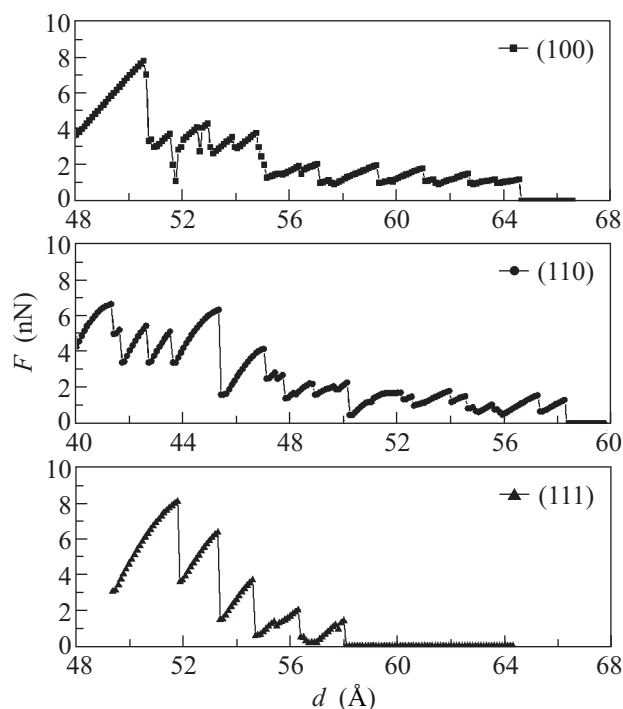


Рис.2. Осцилляция силы упругости, возникающей в широком контакте палладия при растяжении с учетом разной ориентации (100), (110), (111) поверхности

яния между поверхностями имеет осциллирующий характер. На начальном этапе значение силы упругости линейно возрастает, а затем резко уменьшается, как и в случае атомного контакта, однако разрыва не наблюдается. Далее значение силы упругости снова возрастает и резко уменьшается; подобное осциллирующее поведение силы упругости наблюдается вплоть до точки разрыва и связано со структурными изменениями в контакте при его растяжении. Линейное увеличение силы соответствует эластичной (упругой) фазе растяжения, в этом случае контакт имеет упорядоченную структуру. При дальнейшем растяжении контакта наступает неэластичная (неупругая) фаза, связанная с образованием неупорядоченной структуры контакта; при этом сила упругости резко уменьшается. Таким образом, процесс растяжения контакта состоит из последовательности упругих и неупругих фаз. Кроме того, стоит отметить, что контакты Pd(100), Pd(110) и Pd(111) при растяжении ведут себя по-разному. Наиболее “тягучий” контакт получился в случае Pd(110) и наиболее хрупкий – в случае Pd(111), как видно из рис.2.

Так стоит отметить тот факт, что перед разрывом широкого контакта в некоторых случаях образуется нанокontakt в виде цепочки из нескольких атомов (атомный контакт); наиболее удачные струк-

туры контактов изображены на рис.3. Для оценки способности формирования атомных контактов для каждого случая было произведено сто расчетов с раз-

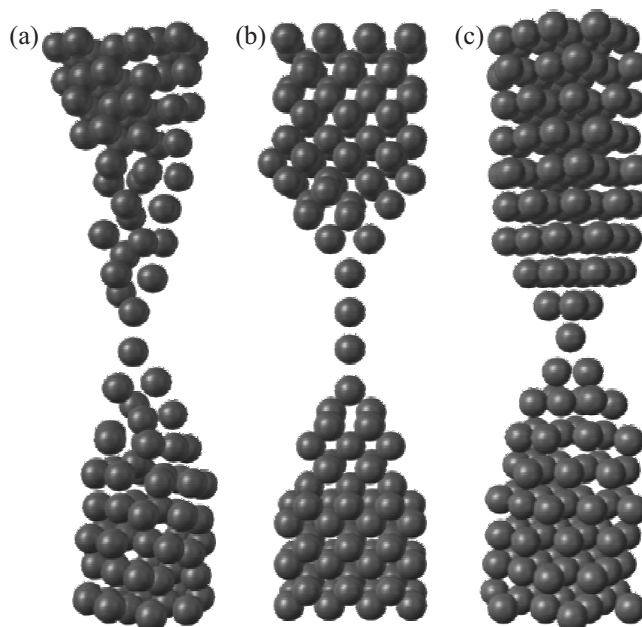


Рис.3. Структура наноконтактов перед разрывом для: а)Pd(100), б)Pd(110) и в) Pd(111)

ными начальными условиями и разной длиной контактов (40–50 Å). Наибольшая вероятность формирования атомных контактов была найдена для Pd(110): в десяти случаях из ста формируется трехатомный контакт (рис.3б), а в двадцати случаях – двухатомный контакт. Формирование контакта, состоящего более чем из двух атомов, для Pd(100) обнаружено не было, а в случае Pd(111) формируются только контакты, показанные на рис.3с.

Теоретические расчеты, представленные в данной работе, показывают, что такие характеристики, как сила разрыва контакта и межатомные расстояния, зависят от ориентации поверхности и сильно отличаются от идеальных случаев: идеальной цепочки атомов и идеального кристалла. Также было показано, что наиболее предпочтительной поверхностью для формирования атомных контактов палладия при растяжении является Pd(110), так как в тридцати процентах случаев образуются двух-трех атомные контакты.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (#МК-43.2009.2). При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного

центра Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

1. Hideaki Ohnishi, Yukihiro Kondo, and Kunio Takayanagi, *Nature* **395**, 780 (1998).
2. J. M. Kras, J. M. van Ruitenbeek, V. V. Fisun et al., *Nature* **375**, 767 (1995).
3. C. Z. Li and N. J. Tao, *Appl. Phys. Letters* **72**, 894 (1998).
4. V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk, W. Hergert et al., *Phys. Rev. B* **70**, 195420 (2004).
5. A. Delin, E. Tosatti, and R. Weht, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 057201 (2004).
6. Varlei Rodrigues, Jefferson Bettini, Paulo Silva, and Daniel Ugarte, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 096801 (2003).
7. V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk, L. Niebergall et al., *Phase Transitions* **78**, 61 (2005).
8. С. В. Колесников, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий, *Письма в ЖЭТФ* **89**, 560 (2009).
9. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
10. D. W. Heerman, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer, 1990.