

# Исследование взаимодействия адатомов Со на вицинальной поверхности Cu(111)

А. Г. Сыромятников, А. Л. Клавсюк<sup>1)</sup>, А. М. Салецкий

МГУ им. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 мая 2014 г.

В рамках теории функционала электронной плотности методом гриновских функций Корринги–Кона–Ростокера вычислены энергии взаимодействия адатомов Со на вицинальной поверхности Cu(111). Продемонстрировано, что взаимодействие между адатомами Со существенным образом зависит от расстояния до ступени. Наши расчеты показали, что значение отталкивающего барьера ступени для адатома Со на верхней террасе больше, чем на нижней.

DOI: 10.7868/S0370274X14130050

В связи с развитием электроники и вычислительной техники существует потребность в постоянной миниатюризации носителей информации. Плотность размещения информации можно увеличить, используя в качестве носителей магнитные атомные проводы, расположенные на вицинальных металлических поверхностях. Главным преимуществом использования ступенчатых поверхностей в качестве подложек является тот факт, что на них одномерные упорядоченные структуры формируются вследствие самоорганизации при эпитаксиальном росте. Такой подход оказывается более экономным, чем метод литографии. Оценки показывают, что для создания одного бита на металлической вицинальной поверхности достаточно порядка сотни атомов кобальта [1].

Несмотря на то что в последнее время одномерные магнитные структуры на вицинальных металлических поверхностях интенсивно исследовались как экспериментально [1–6], так и теоретически [7–11], осталось много вопросов, на которые так и не были найдены ответы. Так, неизвестно, почему при малой концентрации и комнатной температуре островки кобальта формируются на верхней части ступени [4], в то время как при 165 К рост атомных проводов происходит на нижней части ступени [2, 5]. Согласно же теоретическим расчетам атомы Со должны формировать проводы, погруженные в поверхность возле ступени [7]. Ответить на этот вопрос можно, например, с помощью моделирования процессов самоорганизации [8, 12, 13]. Однако такое моделирование невозможно без детального исследования механизмов взаимодействия адатомов на вицинальных поверхностях. Кроме того, взаимодействие

между адатомами играет важную роль во всех явлениях на поверхности. Оно оказывает существенное влияние практически на все свойства наноструктур (структуру, термическую устойчивость, миграцию адатомов по поверхности, реакции на поверхности).

Целью настоящей работы является определение характерных особенностей взаимодействия адатомов Со на вицинальной поверхности Cu(111) как между собой, так и со ступенью этой поверхности.

Для расчетов был использован метод гриновских функций Корринги–Кона–Ростокера (ККР) в приближении локальной спиновой плотности. Этот метод позволяет в рамках теории функционала электронной плотности исследовать любые магнитные наноструктуры на поверхности металлов. Для расчета энергии взаимодействия адатомов и адатома со ступенью применялся подход, предложенный в работе [14].

Как известно, вблизи поверхности металла формируется двумерный электронный газ. Размещение таких дефектов, как адатом или ступень, приводит к рассеянию на них поверхностных состояний, что вызывает осцилляции зарядовой плотности вокруг дефектов. Особенностью вицинальных поверхностей благородных металлов типа (111) является тот факт, что подобное изменение зарядовой плотности можно наблюдать на расстояниях вплоть до 10 нм от дефекта [14–16]. На рис. 1 представлены схематичное изображение атомной ступени на поверхности Cu(111) и изменение плотности состояний на нижней террасе возле ступени. Вычисленный нами период осцилляций электронной плотности состояний на уровне Ферми равен 1.5 нм (половина длины волны Ферми), что хорошо согласуется с экспериментальными данными [15].

<sup>1)</sup>e-mail: klavsyuk@physics.msu.ru

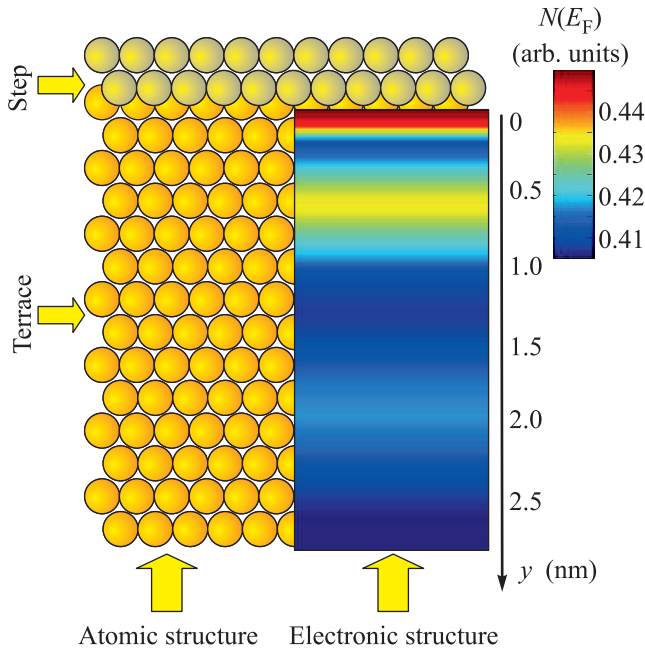


Рис. 1. Схематическое изображение атомной ступени на поверхности Cu(111) (слева). Изменение плотности состояний на нижней террасе возле ступени на поверхности Cu(111) (справа)

Прежде чем перейти к обсуждению расчетов энергии взаимодействия адатомов Co на вицинальной поверхности Cu(111), рассмотрим соответствующую модель. Взаимодействие адатома со ступенью есть суперпозиция нескольких видов взаимодействий. Первое из них – прямое взаимодействие – описывает притяжение адатомов в системе и играет значительную роль на близких расстояниях. Расчет его энергии на расстоянии ближайших соседей был произведен с помощью полуэмпирических потенциалов, используемых в работе [17]. Ко второму типу относится диполь-дипольное взаимодействие адатомов. Расположение адатома на поверхности приводит к несимметричному перераспределению экранирующего заряда. В результате адатом вместе с экранирующим его электронным облаком образует диполь. На ступени также происходит перераспределение экранирующего заряда ее атомов [18]. Поэтому ступень можно рассматривать как систему диполей. Энергия диполь-дипольного взаимодействия адатомов на поверхности была представлена как сумма энергий взаимодействия точечных зарядов  $\pm 0.39e$ . И наконец, третий тип представляет собой взаимодействие адатомов ступени с адатомом Co через электронный газ, который формируется на поверхности металлов. Такое взаимодействие носит дальнедействующий осциллирующий характер. Оно обусловле-

но резким обрывом при энергии Ферми распределения электронов проводимости в металле. В результате интерференция рассеянных на ступени электронных волн с фермиевским импульсом приводит к хорошо известным фриделевским осцилляциям плотности электронов [19]:

$$E_{Fr}(r) = \sum_i \frac{A \cos(2k_F r_i + \delta)}{r_i^2}. \quad (1)$$

На рис. 2 приведена энергия взаимодействия Co со ступенью на поверхности Cu(111) для модельной задачи со следующими параметрами:  $A =$

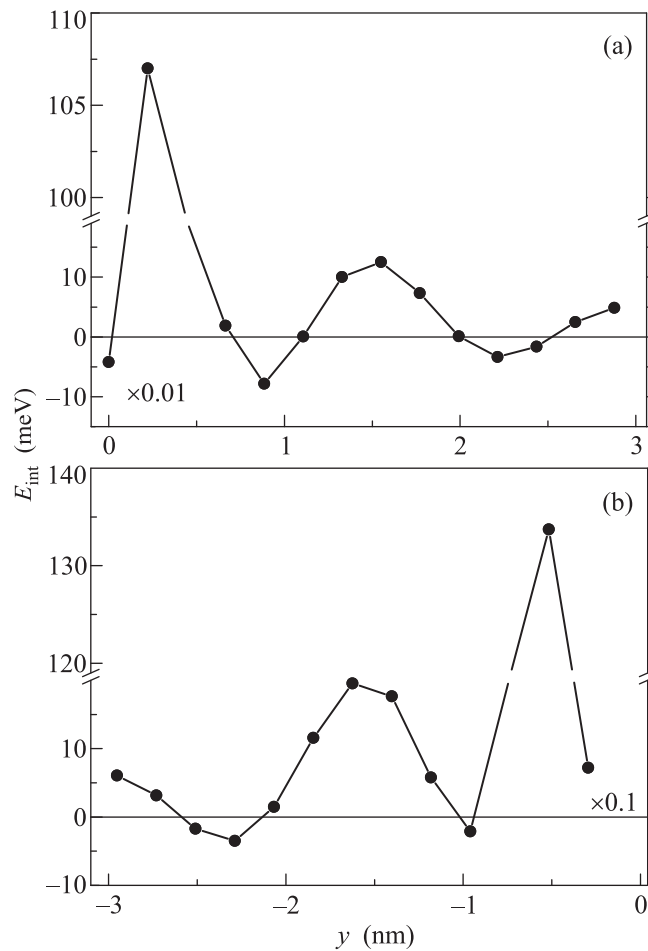


Рис. 2. Энергия взаимодействия Co с бесконечной ступенью поверхности Cu(111) на нижней террасе (a) и на верхней террасе (b), рассчитанная при помощи предложенной модели

$= 115 \text{ мэВ} \cdot \text{Å}^2$ ,  $k_F = 0.21 \text{ Å}^{-1}$ ,  $\delta = 2.9$  рад для нижней террасы и  $\delta = 4.5$  рад для верхней. Именно диполь-дипольное взаимодействие и фриделевское электростатическое взаимодействие объясняют отталкивающий барьер ступени.

Вместе с тем на получение количественных результатов может претендовать только самосогласованный расчет. Дело в том, что перераспределение экранирующего заряда существенно зависит от системы и энергия взаимодействия не всегда может быть представлена в виде суперпозиции энергий разного типа взаимодействий. Энергия взаимодействия адатома Со со ступенью, рассчитанная с помощью метода ККР, приведена на рис. 3. Видно, что пе-

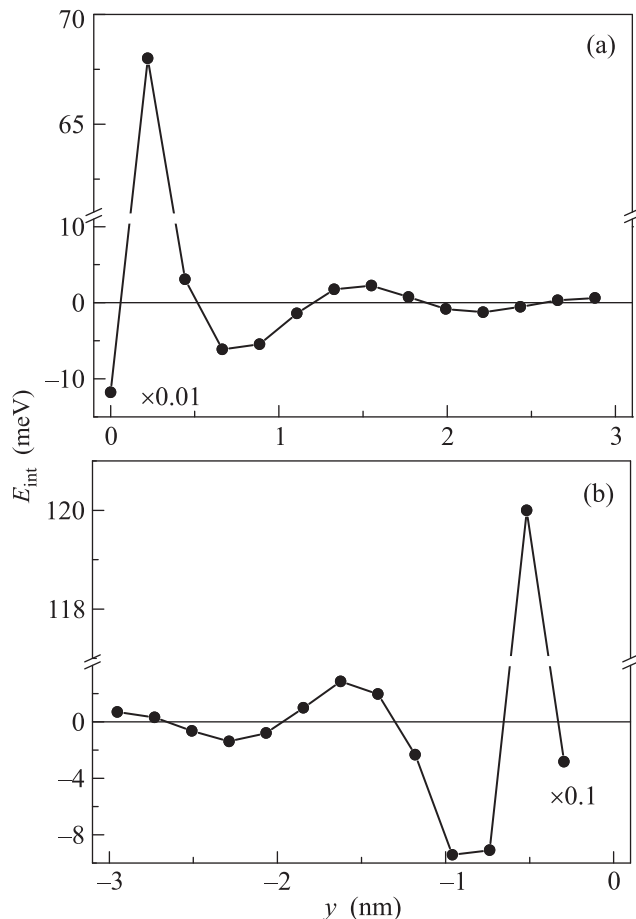


Рис. 3. Энергия взаимодействия Со с бесконечной ступенью поверхности Cu(111) на нижней террасе (а) и на верхней террасе (b), рассчитанная методом ККР

риод осцилляций взаимодействия здесь также равен 1.5 нм как на верхней, так и на нижней части ступени. Наши расчеты показывают, что на расстоянии третьих соседей от ступени адатом испытывает отталкивание. Максимальное значение энергии взаимодействия на нижней части ступени равно 68 мэВ (рис. 3а), а на верхней части – 120 мэВ (рис. 3б). Второй минимум энергии взаимодействия на верхней террасе (–9 мэВ) меньше минимума на нижней террасе (–6 мэВ). Из сравнения результатов первопринципных расчетов и модельной задачи (см. рис. 2 и 3) видно, что они количественно различаются. Однако

модель, в которой используется принцип суперпозиции, способна качественно описать взаимодействие адатома Со со ступенью.

Различие в отталкивающих барьерах для адатома Со со ступенью может приводить к тому, что при низких температурах адатомы Со будут приближаться к ступени с нижней ее части и, как следствие, формировать там структуры. Для подтверждения данного утверждения оценим относительные частоты двух событий для двух различных температур поверхности (100 и 300 К) с помощью формулы

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \exp \frac{E_2 - E_1}{kT}, \quad (2)$$

где  $E_1$ ,  $E_2$  – отталкивающие барьеры на верхней и нижней террасах,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура поверхности. Учитывая отталкивающий барьер как разность между максимумом и минимумом, получаем  $E_2 - E_1 = -55$  мэВ, а для относительных частот находим  $\nu_1/\nu_2 = 0.002$  при 100 К и  $\nu_1/\nu_2 = 0.1$  при 300 К. Таким образом, проведенная оценка показывает, что при 100 К приближение адатома Со к ступени со стороны верхней террасы практически невозможно. Аналогичные рассуждения можно провести и для случая перемешивания адатомов Со с атомами ступени, поскольку барьер этого события равен 120 мэВ [7]. При комнатной температуре указанные вероятности уже одного порядка. Поэтому адатомы Со будут подходить со стороны как нижней, так и верхней террасы. Кроме того, должно происходить и перемешивание с атомами ступени. Это и наблюдалось в экспериментах [4, 8].

Немаловажным является вопрос о взаимодействии между адатомами Со на вицинальной поверхности Cu(111). Энергия взаимодействия Со–Со возле ступени и вдали от нее показана на рис. 4. Вдали от ступени данное взаимодействие имеет дальнodelствующий осциллирующий характер, как и в случае со ступенью (с таким же периодом в 1.5 нм). Однако первый максимум и второй минимум здесь значительно меньше, чем в случае ступени (32 и –2 мэВ соответственно; см. рис. 4а). Возле ступени взаимодействие между адатомами быстро убывает и при расстоянии 2 нм равно нулю. Первый максимум и второй минимум энергии взаимодействия двух адатомов Со возле ступени уменьшаются до значений 13.5 и –0.7 мэВ соответственно (см. рис. 4б). Таким образом, атомы ступени значительно уменьшают дальнodelствующее взаимодействие между адатомами. Уменьшение отталкивающего барьера между адатомами Со связано с уменьшением дипольного момента адатома возле ступени.

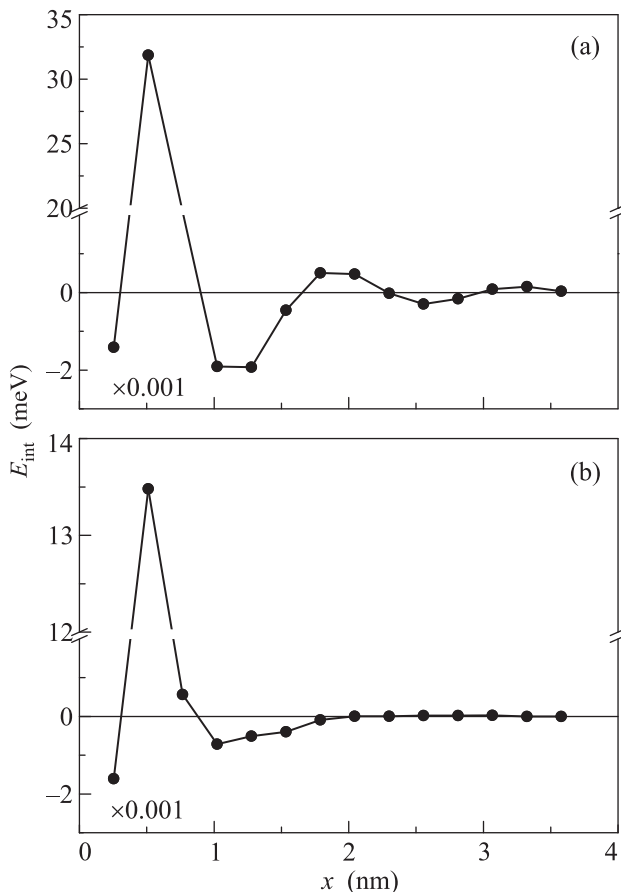


Рис. 4. Энергия взаимодействия между адатомами Co возле ступени (a) и вдали от ступени (b)

Представленные в работе теоретические расчеты показывают отличие взаимодействия адатома Co со ступенью на нижней и верхней террасах вицинальной поверхности Cu(111), которое обусловлено перераспределением заряда на краю ступени. Приведенные результаты объясняют, почему при температурах порядка 100 К формирование наноструктур происходит на нижней части ступени, а при комнатной температуре – на верхней ее части. Также показано, что взаимодействие между двумя адатомами Co на вицинальной поверхности Cu(111) существенно зависит от расстояния до ступени.

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

1. P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S.S. Dhes, C. Grazioli, A. Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P.H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone, and H. Brune, *Science* **16**, 1130 (2003).
2. N. Zaki, C.A. Marianetti, D.P. Acharya, P. Zahl, P. Sutter, J. Okamoto, P.D. Johnson, A.J. Millis, and R.M. Osgood, *Phys. Rev. B* **87**, 161406 (2013).
3. C.E. ViolBarbosa, J. Fujii, G. Panaccione, and G. Rossi, *New J. Phys.* **11**, 113046 (2009).
4. H.W. Chang, F.T. Yuan, Y.D. Yao, W.Y. Cheng, W.B. Su, C.S. Chang, C.W. Lee, and W.C. Cheng, *J. Appl. Phys.* **100**, 084304 (2006).
5. N. Zaki, D. Potapenko, P.D. Johnson, and R.M. Osgood, *Phys. Rev. B* **80**, 155419 (2009).
6. L.-Y. Ma, A. Picone, M. Wagner, S. Surnev, G. Barcaro, A. Fortunelli, and F.P. Netzer, *J. Phys. Chem. C* **117**, 18464 (2013).
7. Y. Mo, K. Varga, E. Kaxiras, and Z. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 155503 (2005).
8. W. Essolaani, F. Picaud, C. Ramseyer, P. Gambardella, M. Said, D. Spanjaard, and M.-C. Desjonqueres, *Surf. Sci.* **605**, 917 (2011).
9. S. Pick, P.A. Ignatiev, A.L. Klavsyuk, W. Hergert, V.S. Stepanyuk, and P. Bruno, *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 446001 (2007).
10. P.A. Ignatiev, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, W. Hergert, and P. Bruno, *Phys. Rev. B* **75**, 155428 (2007).
11. O.V. Stepanyuk, N.N. Negulyaev, P.A. Ignatiev, M. Przybylski, H. Wolfram, A.M. Saletsky, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **79**, 155410 (2009).
12. С.В. Колесников, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 329 (2014).
13. S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, A.L. Klavsyuk, and A.M. Saletsky, *Eur. Phys. Lett.* **103**, 48002 (2006).
14. V.S. Stepanyuk, A.N. Baranov, D.V. Tsvilin, W. Hergert, P. Bruno, N. Knorr, M.A. Schneider, and K. Kern, *Phys. Rev. B* **68**, 205410 (2003).
15. M.F. Crommie, C.P. Lutz, and D.M. Eigler, *Nature* **363**, 524 (1993).
16. F. Silly, M. Pivetta, M. Ternes, F. Patthey, J.P. Pelz, and W.D. Schneider, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 016101 (2004).
17. S.V. Kolesnikov, A.L. Klavsyuk, and A.M. Saletsky, *Phys. Rev. B* **79**, 115433 (2009).
18. R. Smoluchowski, *Phys. Rev.* **60**, 661 (1941).
19. О.М. Браун, В.К. Медведев, *УФН* **157**, 631 (1989).