

12,16

Анизотропия энергетических барьеров для диффузии адатома Со вблизи островов Со на поверхности Cu(100)

© С.В. Колесников, А.Л. Клавсюк, А.М. Салецкий

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

E-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

(Поступила в Редакцию 11 мая 2011 г.)

Методом молекулярной статистики исследовано влияние размеров малых кластеров Со на поверхности Cu(100) на энергетические барьеры диффузионных процессов, происходящих вблизи кластеров и на их поверхности. Установлен механизм возникновения пустых зон вблизи краев кластеров при низкой температуре.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 10-02-01274-а, 11-02-12256). При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

1. Введение

В связи с интенсивным развитием нанотехнологий представляет интерес исследование возможности создания носителей информации наномасштабов. В качестве элементарных носителей информации могут быть использованы малые кластеры, состоящие из атомов ферромагнитных металлов. Как было показано в работе [1], атомы кобальта на немагнитной металлической подложке обладают большим магнитным моментом, причем для создания стабильного при температуре до 350 К бита достаточно 400 атомов. Плотность размещения информации можно увеличить, используя в качестве носителей информации многослойные кластеры из атомов кобальта.

Одним из наиболее дешевых и эффективных способов создания массивов магнитных кластеров является их самоорганизация при эпитаксиальном росте тонкой пленки ферромагнетика. Формирование двухслойных островков Со на поверхности Cu(100), обнаруженное экспериментально 15 лет назад [2], было исследовано теоретически методом ускоренной молекулярной динамики [3] и кинетическим методом Монте-Карло (КММК) [4]. Исследование [4], проведенное с помощью КММК, позволило проследить формирование и эволюцию кластеров Со на больших временных интервалах — от нескольких часов при температуре 300 К до нескольких дней при температуре 200 К. Однако при исследовании самоорганизации кластеров Со при более низких температурах необходимо учитывать анизотропию энергетических барьеров для диффузии адатомов вблизи малых кластеров, связанную с их релаксацией.

Теоретические [5] и экспериментальные [6] работы показали, что смещения атомов на границах малых кластеров Со достаточно велики. Эффекты, связанные с релаксацией малых островков и поверхности подложки рядом с островками, исследованы в ряде ра-

бот [7,8]. В частности, в работе [8] было показано, что вследствие атомной релаксации сильно изменяются магнитные свойства адатомов и малых кластеров. При этом эффекты, связанные с атомной релаксацией, сильно зависят от размеров и формы кластеров.

В настоящей работе исследуется влияние размеров малых кластеров на энергетические барьеры диффузионных процессов (прыжки адатома Со по поверхности подложки и кластера, прыжок адатома Со вдоль границы кластера и присоединение адатома Со к кластеру).

2. Компьютерное моделирование

Описание структурных и динамических свойств атомных систем в общем случае подразумевает решение многочастичной квантово-механической задачи. За исключением простейших случаев, такая задача не имеет аналитического решения, поэтому для нахождения решения обычно пользуются одним из численных методов, который выбирается в зависимости от специфики изучаемой проблемы.

При решении задачи нахождения энергетических барьеров будем считать атомы Со и Cu классическими объектами, тогда первоначальная задача сводится к численному решению системы уравнений Ньютона методом молекулярной статистики. В настоящей работе использованы потенциалы межатомного взаимодействия, полученные в рамках метода сильной связи [9]. Параметры этих потенциалов, полученные из экспериментальных данных и энергетических характеристик гетерогенных наноструктур, приведены в работе [10]. Отметим, что данный подход хорошо зарекомендовал себя при исследовании различных наноструктур [8,10,11].

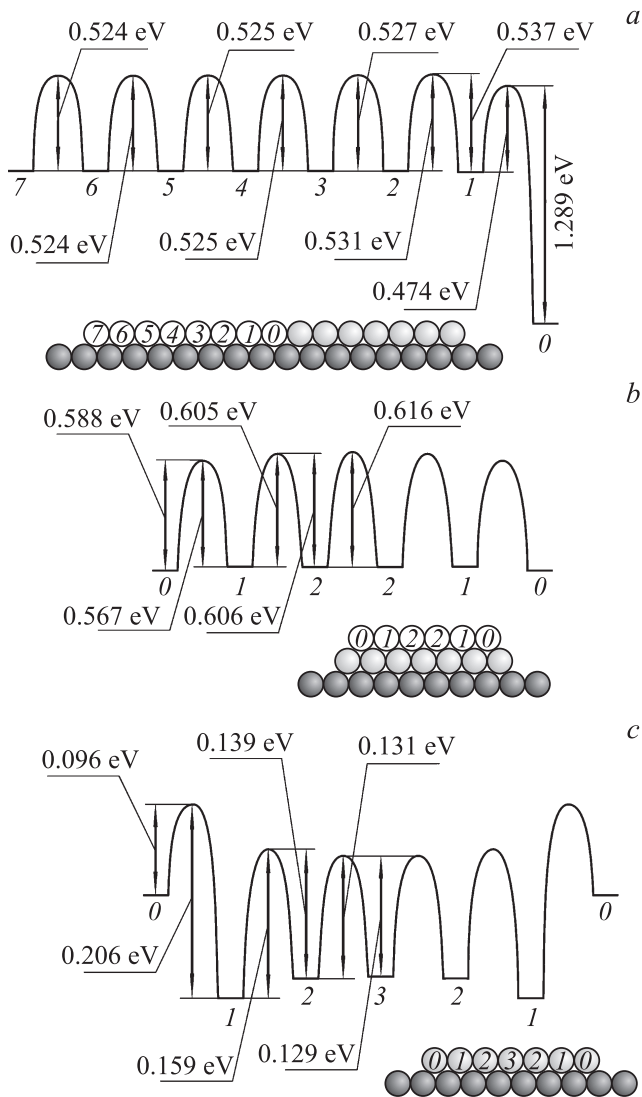


Рис. 1. Энергетические барьеры для прыжков адатома Co вблизи квадратного кластера Co_{49} (a), на его поверхности (b) и вдоль его границы (c). Светлые шарики обозначают атомы Co, темные — атомы Cu. Цифрами обозначены возможные положения адатома Co.

3. Результаты и их обсуждение

Рассмотрим вначале диффузию одиночного атома Co по поверхности Cu(100) (событие T_{00}^{Cu})¹. На рис. 1, a схематически показаны энергетические барьеры для данного события вблизи квадратного кластера из 49 атомов Co (кластер Co_{49}). Из рисунка видно, что кластер не оказывает влияния на диффузию адатома Co на расстоянии более пяти ближайших соседей (1.27 nm). При приближении адатома к кластеру энергетические барьеры начинают возрастать; последний барьер отве-

¹ Здесь и далее нижний индекс nm означает, что адатом Co имеет n ближайших соседей в слое в начальном положении и m — в конечном; верхний индекс показывает сорт атомов, из которых состоит слой непосредственно под рассматриваемым адатомом.

чает присоединению адатома к кластеру (событие E_{01}^{Cu}). Зависимости величин барьеров для прыжков адатома Co между положениями 1, 2 и 3 вблизи кластера от его размера представлены на рис. 2. Из рис. 2 видно, что рост кластера от Co_4 до Co_{49} приводит к сильному увеличению анизотропии энергетических барьеров для события T_{00}^{Cu} . Вблизи больших (~ 100 атомов Co) кластеров энергетический барьер для прыжка адатома из положения 2 в 1 оказывается на 0.004 eV больше, чем для прыжка из положения 2 в 3, что при температуре $T \sim (0.004 \text{ eV})/k_B \approx 45 \text{ K}$ приводит к появлению пустой зоны на расстоянии ближайших соседей от края кластера. При более низких температурах пустая зона может расширяться до двух ближайших соседей за счет анизотропии энергетических барьеров для прыжков адатома Co из положения 3 в положения 2 и 4. Полученные результаты согласуются с экспериментальным наблюдением пустых зон вокруг кластеров при низких температурах [12].

Зависимость энергетического барьера для события E_{01}^{Cu} от размера кластера оказывается более сильной, чем для события T_{00}^{Cu} . Величина энергетического барьера монотонно возрастает от значения 0.442 eV, соответствующего барьеру для образования димера, до предельного значения 0.491 eV, соответствующего барьеру для прыжка адатома к ступени (предельный случай границы кластера). Изменение энергетического барьера в пределах 0.05 eV в данном случае не оказывает существенного влияния на механизм образования пустых зон вблизи кластера Co, поскольку величина барьера для события E_{01}^{Cu} в любом случае существенно меньше, чем для события T_{00}^{Cu} , и адатом Co, оказавшись в положении 1, с большой вероятностью присоединяется к кластеру. Отметим, однако, что указанная зависимость величины энергетического барьера для события E_{01}^{Cu} от размера

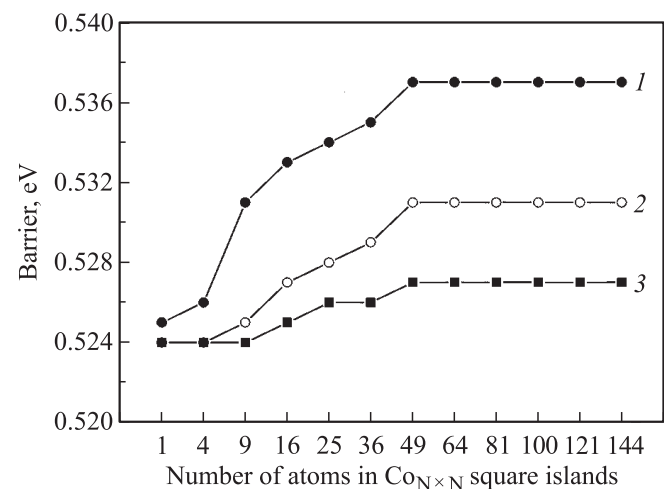


Рис. 2. Зависимость значений энергетических барьеров для события T_{00}^{Cu} от размера кластера. Кривая 1 — прыжок адатома Co из положения 1 в 2, кривая 2 — прыжок адатома Co из положения 2 в 1, кривая 3 — прыжок адатома Co из положения 2 в 3 (см. рис. 1, a).

кластера может оказаться весьма существенной при исследовании процесса роста малых кластеров Co.

Рассмотрим диффузию адатома Co по поверхности кластера (событие T_{00}^{Co}). На рис. 1, *b* схематически изображены энергетические барьеры для случая квадратного кластера Co_{49} . Как видно из рисунка, разница между максимальным и минимальным значением энергетических барьеров составляет почти 0.05 eV. Наибольшая анизотропия энергетических барьеров наблюдается вблизи края кластера, что приводит к необходимости учета релаксации при исследовании эволюции кластеров, состоящих из нескольких десятков атомов, даже при комнатной температуре. На рис. 3 представлены зависимости энергетических барьеров для прыжков адатома Co из положения 1 в 0, из 0 в 1, из 1 в 2 и из 2 в 1. Из рис. 3 видно, что значение энергетического барьера для перехода из положения 0 в 1 для всех исследованных кластеров почти на 0.02 eV больше, чем для обратного перехода из 1 в 0. С другой стороны, начиная с кластера, состоящего из 49 атомов (Co_{49}), значение энергетического барьера для перехода из положения 2 в 1 оказывается больше, чем для перехода из 1 в 2. Разница между этими двумя значениями возрастает с ростом кластера и достигает ~ 0.01 eV для кластера Co_{144} . Вследствие анизотропии энергетических барьеров для события T_{00}^{Co} положение 1 для квадратных кластеров, больших чем Co_{49} , оказывается энергетически невыгодным, что приводит к образованию пустой зоны на поверхности кластера вблизи его края при температуре ниже $T \sim (0.01 \text{ eV})/k_B \approx 115$ K. Данный результат согласуется с экспериментальными наблюдениями пустых зон на поверхности кластеров [13] при низкой температуре.

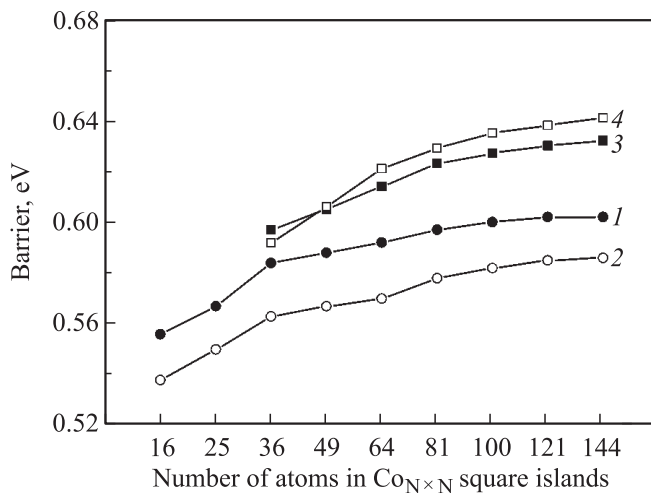


Рис. 3. Зависимость значений энергетических барьеров для события T_{00}^{Co} от размера кластера. Кривая 1 — прыжок адатома Co из положения 0 в 1, кривая 2 — прыжок адатома Co из положения 1 в 0, кривая 3 — прыжок адатома Co из положения 1 в 2, кривая 4 — прыжок адатома Co из положения 2 в 1 (см. рис. 1, *b*).

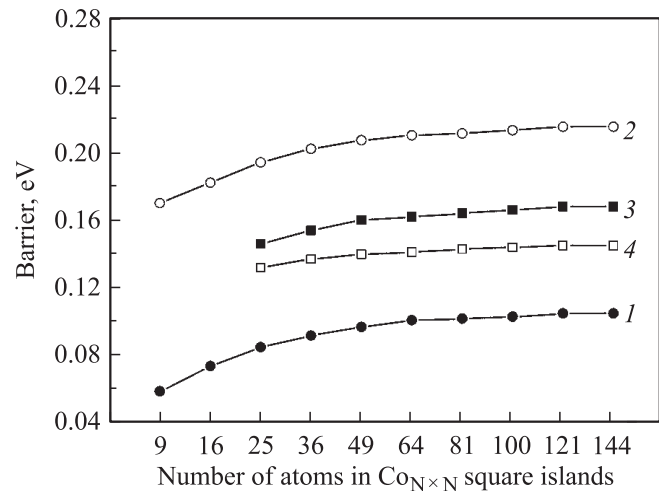


Рис. 4. Зависимость значений энергетических барьеров для события E_{11}^{Co} от размера кластера. Кривая 1 — прыжок адатома Co из положения 0 в 1, кривая 2 — прыжок адатома Co из положения 1 в 0, кривая 3 — прыжок адатома Co из положения 1 в 2, кривая 4 — прыжок адатома Co из положения 2 в 1 (см. рис. 1, *c*).

Обсудим влияние размера кластера на диффузию адатома Co вдоль его границы — событие E_{11}^{Cu} (рис. 2, *c*). В данном случае помимо эффекта релаксации сильное влияние на величину энергетического барьера оказывает различное количество соседей в начальном и конечном положениях адатома, поэтому величина энергетического барьера начинает сильно изменяться при приближении адатома к краю кластера. Наибольшая анизотропия энергетических барьеров наблюдается для переходов из положения 0 в положение 1 и обратно. В данном случае адатомы Co в положениях 0 и 1 имеют разное количество вторых соседей, в результате чего энергетические барьеры для переходов из положения 0 в 1 и из 1 в 0 для кластера Co_{49} отличаются на 0.11 eV. На рис. 4 изображены зависимости энергетических барьеров для переходов из положения 0 в 1, из 1 в 0, из 1 в 2 и из 2 в 1 от размера кластера. Из рисунков 1, *c* и 4 видно, что анизотропия энергетических барьеров для события E_{11}^{Cu} быстро уменьшается при удалении от углов кластера. Однако при низких температурах анизотропия энергетических барьеров вблизи углов кластера может оказать существенное влияние на диффузию адатомов Co вдоль границы кластера: привести к появлению пустых зон и существенному замедлению угловой диффузии (уменьшению числа переходов адатомов Co через углы кластера). Отметим, что форма кластеров, формирующихся в процессе эпитаксиального роста тонкой пленки, отличается от строго квадратной, поэтому стоит ожидать, что разброс в значениях энергетических барьеров для события E_{11}^{Cu} для реальных кластеров не столь существен.

4. Заключение

Рассмотренные события T_{00}^{Cu} , T_{00}^{Co} , E_{01}^{Cu} , E_{11}^{Cu} являются наиболее типичными для системы Co/Cu(100), и полученные выше закономерности позволяют сделать следующие выводы. Во-первых, наибольшая анизотропия энергетических барьеров наблюдается вблизи границ и в особенности углов кластеров. Во-вторых, при увеличении размеров кластеров эта анизотропия возрастает, что при низких температурах приводит к появлению пустых зон как на самих кластерах, так и вблизи них. В-третьих, при исследовании эволюции системы малых (порядка нескольких десятков атомов) кластеров зависимость значений энергетических барьеров от размера кластеров необходимо учитывать не только при низкой, но и при комнатной температуре. Сделанные выше выводы можно без труда обобщить на любую систему, состоящую из атомов $3d$ - и $4d$ -металлов. В каждом конкретном случае надо лишь уточнить понятие „малого“ кластера и „низкой“ температуры.

Список литературы

- [1] P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S.S. Dhesi, C. Grazioli, A. Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P.H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone, H. Brune. *Science* **16**, 1130–1122 (2003).
- [2] U. Ramsperger, A. Vaterlaus, P. Pfäffli, U. Maier, D. Pescia. *Phys. Rev. B* **53**, 8001 (1996).
- [3] R.A. Miron, K.A. Fichthorn. *Phys. Rev. B* **72**, 035 415 (2005).
- [4] С.В. Колесников, А.Л. Клавсюк, А.М. Салецкий. *ФТТ* **89**, 1183 (2009).
- [5] V.S. Stepanyuk, D.I. Bazhanov, A.N. Baranov, W. Hergert, P.H. Dederichs, J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **62**, 15 398 (2000).
- [6] O. Mironets, H.L. Meyerheim, C. Tusche, V.S. Stepanyuk, E. Soyka, P. Zschack, H. Hong, N. Leutter, R. Felici, J. Kirschner. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096 103 (2008).
- [7] V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, L. Niebergall, A.M. Saletsky, W. Hergert, P. Bruno. *Phase Transi.* **78**, 61 (2005).
- [8] S. Pick, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, L. Niebergall, W. Hergert, J. Kirschner, P. Bruno. *Phys. Rev. B* **70**, 224 419 (2004).
- [9] F. Cleri, V. Rosato. *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
- [10] S.V. Kolesnikov, A.L. Klavsyuk, A.M. Saletsky. *Phys. Rev. B* **79**, 115 433 (2009).
- [11] S.V. Kolesnikov, A.L. Klavsyuk, A.M. Saletsky. *Phys. Rev. B* **80**, 245 412 (2009).
- [12] S.C. Wang, G. Erhlich. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 41 (1993).
- [13] A. Golzhauser, G. Erhlich. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1334 (1996).