

02;11;12

## Использование атомно-силового микроскопа в режиме модификации поверхности для определения энергии миграции поверхностных дефектов

© Е.В. Благов<sup>1</sup>, Г.Л. Климчицкая<sup>2</sup>, В.М. Мостепаненко<sup>1</sup><sup>1</sup>Исследовательско-внедренческое предприятие "Модус", 125047 Москва, Россия<sup>2</sup>Северно-Западный заочный политехнический институт, 191186 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 12 августа 1997 г. В окончательной редакции 20 октября 1998 г.)

Вычислены линии постоянной силы и профили горизонтальной компоненты силы при сканировании острия атомно-силового микроскопа над поверхностной вакансией в решетке плотной упаковки с учетом смещений атомов. Характер силовых линий изучен во всех трех режимах сканирования, реализующихся при различных значениях силы: без модификации поверхности острием, с единичным актом миграции вакансии на одно межатомное расстояние противоположно направлению движения острия и с "увлечением" вакансии острием. Показано, что профили горизонтальной компоненты силы дают возможность вычислить значение энергии активации поверхностной миграции вакансии. Приведена оценка силы сканирования, при которой описанные эффекты могут наблюдаться экспериментально.

### Введение

В последнее время метод атомно-силовой микроскопии нашел многочисленные применения не только при исследовании микроструктуры поверхности (см., например, [1,2]), но и для изучения атомного трения [3–5]. Как известно, в контактной моде, когда преобладающими силами между острием атомно-силового микроскопа (АСМ) и поверхностью образца являются силы отталкивания обменной природы, при использовании достаточно острого острия достигается наибольшее разрешение по горизонтали порядка единиц ангстрем [6]. При этом проведенные экспериментальные и теоретические исследования (см., например, [7–13]) показали, что характер сканирования и получаемые поверхности постоянной силы зависят от атомной структуры кончика острия. В частности, в простейшем случае "одноатомного" острия (когда только один атом на самом его кончике взаимодействует с атомами поверхности) при достаточно больших силах сканирования в контактной моде поверхности постоянной силы имеют разрывы [10–13], в которые острие неизбежно проваливается, утыкаясь в исследуемую поверхность [4,14]. Для обеспечения непрерывного сканирования на кончике острия должен находиться достаточно большой атомный кластер [9–11] ("кластерное" острие).

Согласно результатам работ [11,13,15,16], АСМ может использоваться для диагностики точечных дефектов, локализованных на поверхности твердого тела. Это заключение было недавно подтверждено экспериментально [17] при сравнительном изучении вакансий на поверхности, предварительно подвергнутой радиационному облучению, методами сканирующей туннельной и атомно-силовой микроскопии. Следующим шагом могла бы стать попытка использования АСМ для определения

энергетических характеристик процесса миграции дефектов, в первую очередь вакансии [18]. Имеющаяся в настоящее время информация о подобных характеристиках является совершенно недостаточной. Хотя некоторые результаты и были получены методом математического моделирования (см., например, [19–21] и цитируемую там литературу), они оказались весьма чувствительными к выбору потенциала (см. обсуждение этого вопроса в [20]). Кроме того, на процесс миграции существенное влияние оказывают тепловые флуктуации [21], что также усложняет соответствующие расчеты. Таким образом, возможность прямого определения энергии активации миграции дефекта с помощью АСМ представляет значительный интерес.

Для изучения энергетических характеристик дефекта необходимо использовать АСМ в режиме модификации поверхности, при котором острие АСМ может изменять положения атомов, например, передвигая соседний с вакансией атом на ее место (возможность подобных процессов в случае межзельного атома на поверхности кремния обсуждалась в [4]). Для интерпретации соответствующих экспериментальных результатов необходимо проводить расчеты с учетом движения атомов под действием острия. С этой целью удобно использовать простую модель, разработанную в [7], которая, однако, позволяет достаточно хорошо описывать сканирование именно в контактной моде, когда силами притяжения между острием и поверхностью можно пренебречь (данная модель использовалась также в [22] для определения влияния подвижности атомов на разрывы поверхностей постоянной силы). В рамках данной модели, развитой в настоящей работе для описания процесса сканирования с модификацией поверхности, потенциальная энергия  $U$  системы образец плюс острие АСМ представляется в виде суммы энергии взаимодействия  $U_{1s}$  атомов острия с

атомами образца, а также энергий взаимодействия  $U_s$  и  $U_t$  атомов соответственно образца и острия между собой. Первый из указанных членов, описывающий обменное отталкивание острия и поверхности, может быть приближенно представлен как сумма потенциалов  $\alpha/r^{12}$ , где  $\alpha$  — феноменологическая константа обменного взаимодействия,  $r$  — расстояние между взаимодействующими атомами. Члены же  $U_s$  и  $U_t$  рассматриваются как энергии решетки в гармоническом приближении (кроме вклада соседних с вакансией атомов, раздел 1). В результате поверхности постоянной силы  $z = z(x, y, F_0)$ , а также положения отдельных атомов образца и острия  $\mathbf{r}_i$  могут быть найдены как решения системы уравнений

$$-\frac{\partial U}{\partial z} = F_0, \quad \text{grad}_{\mathbf{r}} U = 0. \quad (1)$$

В данной работе рассчитаны линии постоянной силы, а также профили горизонтальной силы при сканировании в контактной моде кластерного острия над поверхностью решетки плотной упаковки, содержащей вакансию. Показано, как силовые линии выглядят при различных режимах сканирования, которые имеют место в зависимости от величины силы: без модификации исследуемой поверхности, с изменением положения дефекта на один параметр решетки в направлении, противоположном направлению сканирования, и со сложной модификацией поверхности, когда острие АСМ увлекает за собой вакансию в процессе сканирования.

## 1. Линии постоянной силы при сканировании над вакансией в решетке плотной упаковки

Для устранения зависимости получаемых результатов от феноменологического параметра обменного взаимодействия  $\alpha$ , значение которого известно с невысокой точностью, будем использовать безразмерные значения координат, сил и энергий

$$\tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{a}, \quad \tilde{F} = \frac{F}{F_0}, \quad \tilde{U} = \frac{U}{F_0 a}, \quad (2)$$

где  $a$  — равновесное расстояние между атомами в невозмущенной решетке плотной упаковки;  $F_0 = 12\alpha/d^{13}$  — сила, действующая на одноатомное острие, находящееся на начальной высоте  $d$  над атомом поверхности.

С учетом сказанного во Введении безразмерная энергия взаимодействия острия и образца записывается в виде

$$\tilde{U}_{ts} = \frac{1}{12} \left(\frac{d}{a}\right)^{13} \sum_{i,j} \frac{1}{\tilde{r}_{ij}^{12}}, \quad (3)$$

где  $\tilde{r}_{ij}$  — безразмерное расстояние между атомами острия и образца.

Следуя [10,11,13], будем использовать модель острия, обеспечивающую описание непрерывного процесса сканирования над вакансией при любых начальных высотах

$d$  (острие моделируется параболоидом [23] с радиусом кривизны  $R = 5a/3$ , на кончике которого находится кластер из семи атомов, причем один из них расположен на расстоянии  $h \approx 0.22a$  под центром правильного шестиугольника со стороной  $b = 0.85a$ , образованного остальными шестью; см. подробности в [10,11,13]). Тогда индекс  $j$  в (3) принимает значения от 1 до 7. Согласно результатам [22], учет подвижности атомов кластера на кончике острия лишь незначительно сказывается на форме поверхностей постоянной силы и профилях горизонтальной составляющей силы. По этой причине ниже будет приниматься во внимание только подвижность атомов образца. Таким образом, энергия острия  $U_t$  предполагается неизменной в процессе сканирования и ее можно не учитывать.

Рассматривая энергию решетки  $U_s$  в гармоническом приближении, общее выражение для энергии упругих смещений [24] с учетом симметрии решетки плотной упаковки можно представить в виде

$$\tilde{U}_s = \frac{1}{2} \sum_{i,k} \tilde{D}^{(i,k)} (\Delta \tilde{\mathbf{r}}_i, \Delta \tilde{\mathbf{r}}_k), \quad (4)$$

где величины  $\Delta \tilde{\mathbf{r}}_i = \tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_i^{(0)}$  описывают смещения равновесных положений  $\tilde{\mathbf{r}}_i$  атомов решетки в процессе сканирования от их равновесных положений  $\tilde{\mathbf{r}}_i^{(0)}$  в решетке, не взаимодействующей с острием (как известно, процесс сканирования можно рассматривать как квазистатический).

Безразмерные постоянные  $\tilde{D}^{(i,k)}$  связаны с матрицей силовых констант рассматриваемого твердого тела соотношением

$$\tilde{D}^{(i,k)} = \frac{ad^{13}}{12\alpha} D^{(i,k)}. \quad (5)$$

Как показано в [22], при расчете непрерывных силовых поверхностей достаточно ограничиться упрощенным представлением энергии (4), предполагая, что в процессе сканирования смещения испытывают только те атомы поверхностного слоя образца, которых находятся под прямым воздействием острия, и пренебрегая возникающими в результате этого небольшими смещениями соседних с ними атомов. Данное предположение влечет за собой диагональность матрицы силовых констант  $\tilde{D}^{(i,k)} = \tilde{D}\delta_{ik}$ .

Все вышесказанное относилось к случаю упругих смещений атомов в совершенной решетке. Рассмотрим теперь процесс сканирования острия АСМ над поверхностной вакансией. При этом сила, действующая со стороны острия, может быть столь велика, что вызовет неупругие смещения атомов, соседних с вакансией, по направлению к ней. Пусть вакансия расположена в точке  $\tilde{x}_v^{(0)} = 0$  и четыре атома решетки с координатами  $\tilde{x}_i^{(0)} = -2, -1, 1, 2$  для  $i = 1, 2, 3, 4$  соответственно лежат на одной прямой (рис. 1). Здесь пренебрегается атомной релаксацией в ближайшем окружении вакансии для образца, не взаимодействующего с острием. Оправданность такого пренебрежения объясняется тем, что

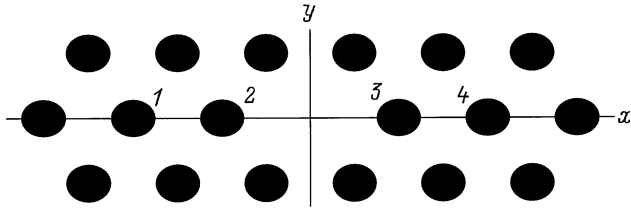


Рис. 1. Схема расположения атомов вблизи вакансии.

приводимые ниже расчеты являются лишь моделированием тех данных, которые должны быть получены с помощью АСМ экспериментально. Последние же учтут влияние релаксации автоматически, фиксируя фактическое положение всех рассматриваемых атомов.

При описании неупругих смещений соседних с вакансией атомов необходимо учесть, что для процесса миграции вакансии основную роль играют ее смещения вдоль оси  $x$  (рис. 1). Поэтому в первом приближении в энергии этих атомов достаточно изменить только зависимость от  $\Delta x$  и заменить соответствующие члены (4) на [25]

$$\tilde{U}_n(\Delta \tilde{x}_i) = \frac{\tilde{D}_n}{2\pi^2} \sin^2(\pi \Delta \tilde{x}_i), \quad (6)$$

где безразмерная постоянная  $\tilde{D}_n$  связана с соответствующей размерной  $D_n$  соотношением (5).

Фактически для смещений соседнего с вакансией атома в сторону от вакансии (согласно рис. 1, это имеет место при  $\Delta \tilde{x}_2 < 0$ ,  $\Delta \tilde{x}_3 > 0$ ) можно положить  $\tilde{D}_n \approx \tilde{D}$ , пренебрегая небольшим изменением этой величины вблизи вакансии. При смещении же в направлении вакансии, вообще говоря,  $\tilde{D}_n < \tilde{D}$ . Очевидно, что для малых смещений энергия (6) приобретает тот же вид, что и соответствующий вклад в (4). В точках  $\Delta = \pm 0.5a$ , т.е. посередине между вакансией и соседними атомами, она имеет максимум, соответствующий потенциальному барьеру с высотой (в обычных единицах)

$$\Delta E = \frac{D_n a^2}{2\pi^2}. \quad (7)$$

Если под воздействием острия атом 2 на рис. 1 сместится вправо на величину  $\Delta x_2 = 0.5$ , то он займет место вакансии, в то время как сама она сместится влево. Тогда уравнение (6) будет описывать потенциальную энергию атома 2 в новом положении  $\tilde{x}_2^{(0)} = 0$ .

Перейдем теперь к вычислению линий постоянной силы при сканировании острия АСМ от начального положения над атомом 1 с координатой  $\tilde{x}_1^{(0)} = -2$  до конечного положения над атомом 4 с координатой  $\tilde{x}_4^{(0)} = 2$ . Начальная высота острия во всех случаях выбирается равной  $d = 0.5a$ . Параметры  $\tilde{D}$ ,  $\tilde{D}_n$  удобно представлять в виде

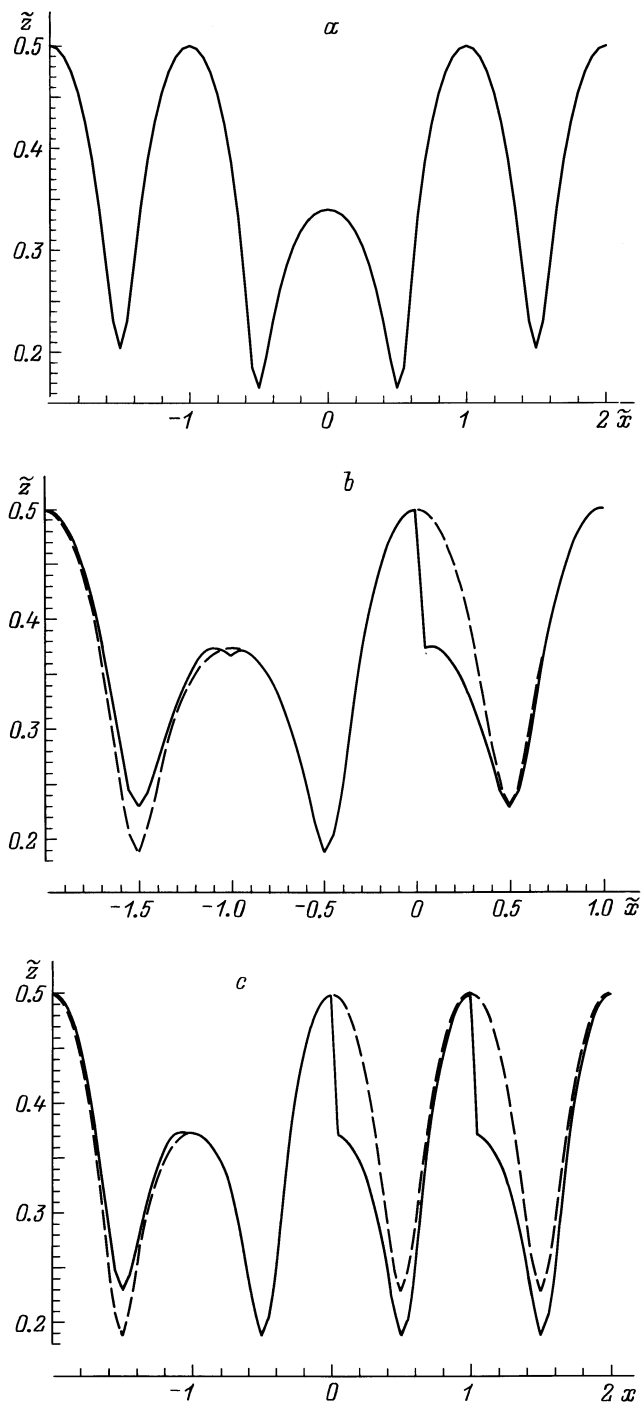
$$\tilde{D} = \frac{1}{\Delta \tilde{l}}, \quad \tilde{D}_n = \frac{1}{\Delta \tilde{l}_n}, \quad (8)$$

где величина  $\Delta \tilde{l}$  имеет смысл упругого смещения атома решетки под действием силы, равной силе сканирования, а  $\Delta \tilde{l}_n$  введена по аналогии.

Решение системы уравнений (1) позволяет описать три режима сканирования для различных значений  $\Delta \tilde{l}_n$  (отметим, что результат практически не зависит от значения  $\Delta \tilde{l}$ , так что ниже мы используем только одно значение  $\Delta \tilde{l} = 0.05$ ). Первый такой режим, отвечающий сканированию без модификации исследуемой поверхности, имеет место при  $\Delta \tilde{l}_n < 0.6$ . В этом случае, даже если атом 2 испытывает неупругие смещения, они остаются достаточно малыми. Так, когда острие приближается к точке  $x = -1$ , атом описывает половину замкнутой траектории с максимальным смещением  $\Delta \tilde{x}_2 < 0.5$ . В момент, когда острие находится над точкой  $\tilde{x} = -1$ , атом снова находится в точке  $\tilde{x} = -1$ , но с  $\Delta \tilde{x}_2 = -0.05$ , т.е. ниже своего исходного положения. Для иллюстрации на рис. 2, а приведена кривая постоянной силы, полученная при решении уравнений (1) с потенциальной энергией, равной сумме (3), (4) и (6), которая практически не зависит от конкретного значения величины  $\Delta \tilde{l}_n < 0.6$ . Таким образом, если переход атома через потенциальный барьер и модификация поверхности отсутствуют, атомные смещения, даже если они столь велики, что не могут рассматриваться как упругие, не оказывают существенного влияния на форму линий постоянной силы.

Второй возможный режим сканирования уже с модификацией исследуемой поверхности имеет место при  $\Delta \tilde{l}_n \approx 0.6$ . В этом случае атом 2 смещается острием на расстояние  $\Delta \tilde{x}_2 = 0.5$  и переходит через максимум потенциального барьера, когда острие достигает точки  $\tilde{x} = -1$  (т.е. положения над равновесной позицией атома 2 в невозмущенной решетке). На рис. 2, б показаны сплошная кривая — линия постоянной силы, полученная в результате решения системы уравнений (1), и штриховая кривая — линия постоянной силы, которая имела бы место при сканировании в первом режиме (т.е. без модификации исследуемой поверхности) над вакансией, расположенной с самого начала в точке  $\tilde{x}_v^{(0)} = -1$ . После перехода через потенциальный барьер атом 2 окажется в точке  $\tilde{x}_2^{(0)} = 0$  и сканирование продолжится таким образом, как если бы вакансия с самого начала находилась в точке  $\tilde{x}_v^{(0)} = -1$ . Как видно из рис. 2, б, по поведению линий постоянной силы в интервале  $(-2, 0)$  трудно заключить, находилась ли вакансия с самого начала в точке  $-1$  или же произошла ее миграция из точки 0. Единственным различием между этими случаями является меньшая глубина минимума (на величину порядка  $0.05a$ ) в точке  $-1.5$  по сравнению с точкой  $0.5$ , если миграция имела место.

Однако сканирование в области  $\tilde{x} > 0$  приводит к более заметным изменениям на линии постоянной силы. Действительно, после достижения острием АСМ области немного правее нового положения атома 2 (напомним, что вакансия находится при этом слева от него) этот



**Рис. 2.** Линии постоянной силы при сканировании острия АСМ над вакансией.

атом значительно сместится влево, хотя и не перейдет через потенциальный барьер (возможность такого перехода обсуждается ниже). Это смещение приводит к существенным изменениям линии постоянной силы: острие упадет на  $\Delta z \approx 0.15$  и максимум на линии постоянной силы примет необычную заостренную форму (рис. 2, *b*). Таким образом, по линиям постоянной силы можно отличить первый режим сканирования от второго.

Рассмотрим теперь третий возможный режим сканирования острия АСМ над вакансией, который реализуется при больших силах (в наших расчетах при  $\Delta \tilde{f}_n > 0.6$ ) и приводит к более глубокой модификации поверхности, чем второй. Для третьего режима характерно то, что атом 2 переходит через потенциальный барьер (а вакансия мигрирует на его первоначальное положение), когда острие находится еще левее точки  $\tilde{x} = -1$ . Это приводит к серьезным изменениям всего процесса дальнейшего сканирования.

Действительно, когда острие окажется в области правее атома 2 в его новом равновесном положении в точке  $\tilde{x}_2^{(0)} = 0$ , оно перекинет этот атом через потенциальный барьер влево в его исходное положение. Данный вывод является очевидным следствием полной симметрии между исходной ситуацией и той, которая возникла после первого акта миграции. В результате атом 3 опять оказывается ближайшим к вакансии справа. После того как острие АСМ окажется справа от этого атома, оно перекинет его на место вакансии. Тем самым вакансия переместится вправо и займет положение слева от атома 4, и т.д.

Итак, в начале сканирования острие перемещает вакансию влево на одно межатомное расстояние  $a$ , а в процессе дальнейшего сканирования увлекает ее за собой вправо. При этом острие перекидывает налево через потенциальный барьер каждый следующий атом, мимо которого оно сканирует. Соответствующая линия (сплошная) постоянной силы, рассчитанная при решении уравнений (1), приведена на рис. 2, *c*. На том же рисунке штриховая линия постоянной силы при сканировании острия в режиме без модификации поверхности над вакансией, изначально находящейся в точке  $\tilde{x}_v^{(0)} = -1$ . Как ясно из сравнения рис. 2, *b* и *c*, из рассмотрения сканирования на интервале  $(-2, 1)$  невозможно определить характер модификации поверхности острием АСМ. Однако при рассмотрении интервала  $x > 1$  характер модификации легко определяется. Если имела место лишь единичная миграция вакансии влево, то дальнейшее поведение линии постоянной силы будет таким же, как и для совершенной решетки. Если же острие увлекает вакансию за собой, то эти линии обладают ярко выраженными характерными особенностями.

## 2. Горизонтальная составляющая силы и оценка энергии активации процесса миграции вакансии

Как показано в предыдущем разделе, при сканировании острия АСМ над вакансией в контактной моде возможны различные ситуации как без модификации, так и с различной модификацией исследуемой поверхности. Тип взаимодействия острия и вакансии отражается не только на линиях постоянной силы, но и на профилях горизонтальной составляющей силы. Кроме того, как

показано ниже, данные профили содержат важную дополнительную информацию, позволяющую дать количественную оценку энергии активации процесса миграции вакансии.

В процессе сканирования горизонтальные силы, действующие на острие, могут быть измерены независимо (см., например, [2–5]), а для интерпретации экспериментальных результатов их можно рассчитать. Действительно, определив точку на поверхности постоянной силы  $\tilde{z}$ , а также радиус-векторы  $\mathbf{r}_i$  атомов образца для каждого положения острия  $(\tilde{x}, \tilde{y})$  в результате решения системы уравнений (1), не представляет труда определить значения горизонтальных сил  $F_x$  и  $F_y$ , действующих на острие при адиабатическом сканировании [26]. В безразмерных единицах имеем

$$\tilde{F}_x = \left(\frac{d}{a}\right)^{13} \sum_{i,j} \frac{\tilde{x} + \tilde{x}_{(t)j} - \tilde{x}_i}{\tilde{r}_{ij}^{14}}, \quad (9)$$

где  $\tilde{x}_{(t)j}$  — компонента радиус-вектора атомов кластера на кончике острия (аналогичное выражение имеет место для  $y$ -компоненты).

Приведем теперь результаты расчета горизонтальной силы по формуле (9) для всех трех режимов сканирования острия АСМ над вакансией, перечисленных в предыдущем разделе. Для первого режима (модификация поверхности отсутствует,  $\Delta\tilde{l}_n < 0.6$ ), профили горизонтальной силы приведены на рис. 3, *a*. Как и в случае линий постоянной силы, результаты здесь практически не зависят от значения  $\Delta\tilde{l}_n$ .

Для второго режима, соответствующего простейшей модификации поверхности ( $\Delta\tilde{l}_n \approx 0.6$ ), профили горизонтальной силы показаны на рис. 3, *b* сплошной линией (штриховой кривой показан профиль горизонтальной силы, когда модификация отсутствует, а вакансия занимает положение  $\tilde{x}_v^{(0)} = -1$ ). Как видно из рис. 3, *b*, в случае, когда происходит миграция, профиль силы становится асимметричным. Эта асимметрия наиболее заметна, когда острие сканирует непосредственно над вакансией, т.е. на промежутке  $(-1.5, 0.5)$ , и дает принципиальную возможность определить высоту потенциального барьера, преодолеваемого атомом 2 (см. ниже).

Профиль горизонтальной составляющей силы для третьего режима сканирования показан на рис. 3, *c* сплошной линией (штриховая кривая, как и на рис. 3, *b*, соответствует вакансии в точке  $\tilde{x}_v^{(0)} = -1$ ). Как и в случае линий постоянной силы, различие между рис. 3, *c* и *b* проявляется только при рассмотрении сканирования на промежутке  $\tilde{x} > 1$ .

Перейдем теперь к оценке энергии активации процесса миграции вакансии по измеренным профилям горизонтальной составляющей силы, подобным показанным на рис. 3, *b* и *c*. Для этого рассмотрим сканирование острия вблизи атома 2, который смещается острием

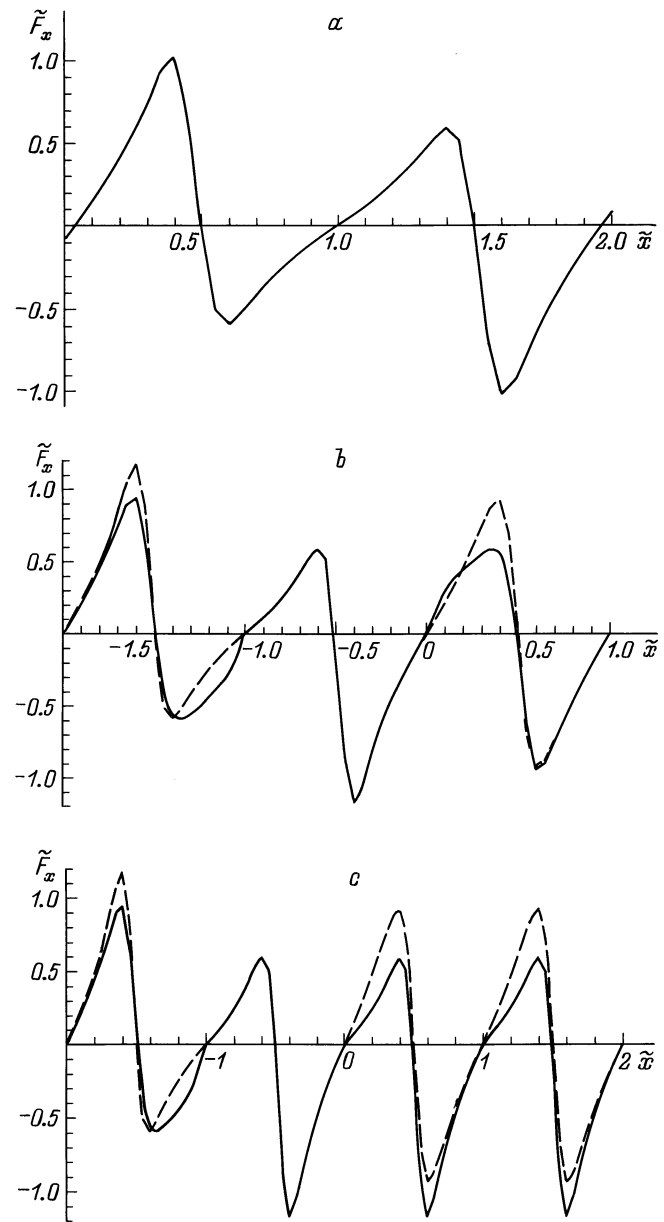


Рис. 3. Профили горизонтальной компоненты силы при сканировании острия АСМ над вакансией.

вправо. В этой области сканирование происходит достаточно гладко, без каких-либо скачков на линии постоянной силы. Отметим также, что значение горизонтальной составляющей силы определяется взаимодействием острия не только с атомом 2, но и с другими атомами ячейки.

Предположим, что с помощью АСМ получены горизонтальные компоненты силы для двух различных ситуаций: когда при сканировании острие сдвигает атом 2 на место вакансии ( $\tilde{F}_x$ ) и когда сканирование происходит без модификации поверхности ( $\tilde{F}_x^{(0)}$ ). Эти данные промоделированы выше и представлены на рис. 3, *b* сплошной и штриховой кривыми соответственно. Тогда работа

острия по перемещению атома 2 на место вакансии может быть выражена (в обычных единицах) как

$$A = -F_0 a \int_{\tilde{x}_1^{(0)}}^{\tilde{x}_2^{(0)}} (\tilde{F}_x - \tilde{F}_x^{(0)}) d\tilde{x}, \quad (10)$$

где  $\tilde{x}_1^{(0)} = -2$ ,  $\tilde{x}_2^{(0)} = -1$  —  $x$ -координаты атомов 1 и 2 в невозмущенной решетке.

Очевидно, что эта работа пропорциональна площади, заключенной между сплошной и штриховой кривыми на рис. 3, *b*.

Можно ожидать, что при экспериментальном исследовании в режиме с модификацией поверхности будет получен только один профиль  $\tilde{F}_x$ . Следует отметить, однако, что при сканировании острия в интервале от  $\tilde{x}_2^{(0)} = -1$  до  $\tilde{x}_v^{(0)} = 0$ , как это видно из рис. 3, *b*,  $\tilde{F}_x = \tilde{F}_x^{(0)}$ , т.е. сплошная и штриховая кривые совпадают. В дополнение к этому профиль  $\tilde{F}_x^{(0)}$  симметричен относительно точки  $\tilde{x}_2^{(0)} = -1$ . Поэтому выражение (10) для работы может быть переписано как

$$A = -F_0 a \int_{\tilde{x}_1^{(0)}}^{\tilde{x}_v^{(0)}} \tilde{F}_x d\tilde{x}. \quad (11)$$

Интересно рассмотреть, как в нашей модели согласуются работа (10) и высота используемого потенциального барьера (7). Принимая во внимание соотношение  $\Delta \tilde{l}_n = F_0 / (aD_n)$ , вытекающее из (5), (8), последнюю можно выразить как функцию  $\Delta \tilde{l}_n$

$$\Delta E = \frac{F_0 a}{2\pi^2 \Delta \tilde{l}_n}. \quad (12)$$

Для значения  $\Delta \tilde{l}_n \approx 0.6$ , при котором происходит миграция вакансии, из (12) имеем  $\Delta E = 0.084 F_0 a$ . С другой стороны, при вычислении по формулам (10) или (11) с использованием профилей рис. 3, *b* получается  $A = 0.083 F_0 a$  (для получения этого результата мы провели численное интегрирование с шагом  $0.05a$ , т.е. с тем же шагом, который использовался при расчете кривых рис. 3, *b*). Количественное согласие между полученными значениями величин  $A$  и  $\Delta E$  подтверждает согласованность предложенного метода и возможность использования формулы (11) для определения энергии активации процесса миграции вакансии по измеренным при сканировании профилям горизонтальной силы.

Оценим теперь в рамках нашей модели ориентировочные значения силы сканирования, при которой вакансия может быть перемещена острием АСМ в новое положение. В качестве примера воспользуемся данными для алюминия ( $a = 2.87 \text{ \AA}$ ). По разным оценкам, энергия миграции  $E_m = \Delta E = A$  равняется  $E_m^{(1)} \approx 0.9 \text{ eV}$  либо  $E_m^{(2)} \approx 0.5 \text{ eV}$  [25,27]. Соответственно сила сканирования

$F_0 = A / (0.083a)$ , при которой происходит миграция, составляет  $F_0^{(1)} \approx 6.0nN$  либо  $F_0^{(2)} \approx 3.4nN$ . Подобные значения сил являются вполне обычным для АСМ, работающего в контактной моде. Поэтому можно ожидать, что миграция вакансии под влиянием острия АСМ будет зарегистрирована экспериментально в ближайшем будущем.

### 3. Обсуждение результатов

В рамках использованной выше простой модели гармонических смещений атомов поверхности под воздействием острия АСМ (за исключением смещений соседних с вакансией атомов, рассматриваемых как ангармонические) были рассчитаны линии постоянной силы и профили горизонтальной составляющей силы при сканировании над вакансией в решетке плотной упаковки. При этом оказалось, что в зависимости от значения параметра  $\Delta \tilde{l}_n$ , характеризующего подвижность соседних с вакансией атомов возможны три принципиально различных режима сканирования: без модификации поверхности, с единичным актом миграции вакансии на одно межатомное расстояние в направлении, противоположном направлению сканирования, и с "увлечением" вакансии острием АСМ. Данные режимы были рассчитаны в предположении, что острие сканирует вдоль линии атомов поверхности. Однако легко убедиться в том, что миграция вакансии под воздействием острия происходит аналогичным образом и при сканировании острия под небольшим углом к указанной оси.

Фактически различные значения безразмерного нормированного параметра  $\Delta \tilde{l}_n$  отвечают не разным упругим свойствам материала образца, а разным значениям силы сканирования над одним и тем же образцом. Поэтому, проводя последовательно сканирование над вакансией со все возрастающими силами и фиксируя каждый раз профили горизонтальной составляющей силы, можно определить значение силы, при которой первый режим сканирования сменяется вторым.

Наиболее важным выводом работы является обоснованная в ней возможность определения энергии активации миграции поверхностной вакансии по измеренным профилям горизонтальной составляющей силы в режимах сканирования, отвечающих модификации поверхности острием АСМ. Проведенные с использованием литературных данных оценки показывают, что указанные режимы могут реализоваться при значениях сил, типичных для АСМ в контактной моде. Это позволяет надеяться на экспериментальное подтверждение полученных выше результатов.

Авторы благодарны В.И. Панову за интерес к данной работе и плодотворные обсуждения.

## Список литературы

- [1] *Quate C.F.* // Surf. Sci. 1994. Vol. 299/300. P. 980–995.
- [2] *Magonov S.N., Myung-Hwan Whangbo* // Surface Analysis with STM and AFM. Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1996.
- [3] *Putman C.A.J., Igarashi M., Kaneko R.* // Appl. Phys. Lett. 1995. Vol. 66. N 23. P. 3221–3223.
- [4] *Howald L., Lüthi R., Meyer E., Güntherodt H.-J.* // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 51. N 8. P. 5484–5487.
- [5] *Sørensen M.R., Jacobsen K.W., Stoltze P.* // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. N 4. P. 2101–2113.
- [6] *Albrecht T.R., Quate C.F.* // J. Vac. Sci. Technol. A. 1988. Vol. 6. N 2. P. 271–274.
- [7] *Gould S.A.C., Burke K., Hansma P.K.* // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 40. N 8. P. 5363–5366.
- [8] *Ciraci S., Baratoř A., Batra I.P.* // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. N 5. P. 2763–2775.
- [9] *Tang H., Joachim C., Devillers J.* // Surf. Sci. 1993. Vol. 291. N 3. P. 439–450.
- [10] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Лобашиев А.А., Мостепаненко В.М.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. Вып. 3. С. 73–80.
- [11] *Blagov E.V., Klimchitskaya G.L., Lobashov A.A., Mostepanenko V.M.* // Surf. Sci. 1996. Vol. 349. P. 196–206.
- [12] *Good B.S., Banerjee A.* // J. Phys. 1996. Vol. 8. N 10. P. 1325–1333.
- [13] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Лобашиев А.А., Мостепаненко В.М.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 6. С. 77–86.
- [14] *Abraham F.F., Batra I.P.* // Surf. Sci. 1989. Vol. 209. N 1/2. P. L125–L132.
- [15] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М.* и др. // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. Вып. 8. С. 73–77.
- [16] *Blagov E.V., Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M.* // Surf. Rev. Lett. 1997. Vol. 4. N 2.
- [17] *Hahn J.R., Kang H., Song S., Jeon I.C.* // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. N 4. P. R1725–1728.
- [18] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М.* и др. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. Вып. 1. С. 71–77.
- [19] *Stumpf R., Scheffler M.* // Phys. Rev. Lett. 1994. Vol. 72. N 2. P. 254–257.
- [20] *Boisvert G., Lewis L.J., Puska M.J., Nieminen R.M.* // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 52. N 12. P. 9078–9085.
- [21] *Kürpich U., Kara A., Rahman T.S.* // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. N 6. P. 1086–1089.
- [22] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М.* // Preprint UFPB-DF-002. 1997.
- [23] *Bordag M., Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M.* // Surf. Sci. 1995. Vol. 328. N 1/2. P. 129–134.
- [24] *Born M., Huang K.* // Dynamic Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon Press, 1968.
- [25] *Flynn C.P.* // Point Effects and Diffusion. Oxford: Clarendon Press, 1972.
- [26] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М., Смирнов М.З.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 2. С. 134–137.
- [27] *Takai O., Doyama M., Hisamatsi Y.* // Point Defects and Defect Interactions in Metals / Ed. J.-I. Takamura, M. Doyama, M. Kiritani. Amsterdam; Oxford; New York: North-Holland Publishing Company, 1982.