

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени
М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

**Комплексное теоретическое исследование атомных и
квантовых свойств одномерных структур в вакууме, в
пористых материалах и на поверхностях подложек**

Выполнил студент

405 группы

Зеленский Владимир Сергеевич

Научный руководитель:

Старший преподаватель кафедры общей физики

к.ф.-м.н., Цысарь Ксения Михайловна

Допущена к защите «___»«_____» 2017г.

Зав. кафедрой

Профессор Салецкий А. М. _____

Подпись зав. кафедрой

Москва 2017

Содержание

Введение.....	3
1. Современное состояние исследований в данной области науки.....	6
1.1. Механические и квантовые свойства свободных одномерных наноструктур (наноконтактов и нанопроводов).....	6
1.2. Механические и квантовые свойства одномерных структур на поверхностях тонких металлических пленок.....	8
1.3. Механические и квантовые свойства тонких пленок.....	10
2. Модель и метод исследования.....	12
2.1. Метод молекулярной динамики и традиционные представления статистической физики.....	12
2.2. Теория функционала электронной плотности.....	17
2.3. Уравнения Кона-Шэма.....	20
2.4. Расчет сил в элементарной ячейке.....	23
2.5. Описание модели.....	24
2.6. Цель работы.....	25
3. Основные результаты и их обсуждение.....	27
3.1. Исследование атомной структуры, геометрии и процессов формирования одномерных наноструктур (НП и НК).....	27
3.2. Изучение влияний деформаций на атомную структуру тонких пленок.....	31
3.3. Изучение механических и квантовых свойств одномерных нанопроводов на поверхности немагнитной медной нанопленки.....	36
Основные выводы работы.....	37
Список использованной литературы.....	38

Введение

Среди перспективных и инновационных технологий 21 века ведущее место занимают наноэлектроника и её подраздел – спинтроника, в которой наряду с зарядом частиц для физического представления данных используется спин частиц, что позволяет во много раз увеличить плотность записи и передачи информации. Особый интерес представляют одномерные структуры – наноконтакты (НК) и нанопровода (НП), на основе которых возможно формирование высокоэффективных наносхем с малыми размерами и низким потреблением электроэнергии. Большое внимание уделяется исследованиям металлических НК и НП [1,2,3], стабильных даже при комнатных температурах. Металлические нанопровода и наноконтакты, обладающие магнитными свойствами могут быть рассмотрены, как своеобразные спиновые фильтры, пропускающие электроны преимущественно одной спиновой поляризации, ток в них может быть спин-поляризованным. Интерес к таким наноструктурам объясняется возможностью их применения в устройствах спинтроники. Активное исследование спин-поляризованного электронного транспорта началось с экспериментального открытия в 2002 году баллистического магнетосопротивления в наноконтактах [4], которое представляет собой взаимосвязь между магнитными и транспортными свойствами наноструктур. Открытие баллистического магнетосопротивления привело к активному изучению возможностей управления спином атомов в наноконтактах и нанопроводах и как следствие их транспортными и магнитными свойствами. Так как многие стабильные при комнатных температурах проводящие наноконтакты являются немагнитными, и следовательно, непригодными для применения в устройствах спинтроники, возникает новая область исследований – изучение магнитных и транспортных свойств смешанных наноконтактов и нанопроводов. На сегодняшний день уже возможно создание таких структур. Первой успешной экспериментальной работой по

формированию одномерных смешанных наноконтактов стала работа Беттини и др. [5], в которой они получили стабильные при комнатной температуре Au-Ag наноконтакты. Для спинтроники наиболее интересным представляется исследование свойств смешанных НК и НП из атомов переходных и благородных металлов (Au, Pt и др.), обладающих низкой реакционной способностью, и атомов магнитных элементов (Co, Fe, Ni и др.). В результате получившиеся структуры могут обладать уникальными физическими свойствами, такими как гигантская магнитная анизотропия, баллистическое магнетосопротивление, при этом обладая высокой структурной устойчивостью к внешним воздействиям различной природы. Однако, в процессе формирования наноконтактов и нанопроводов в их структуре возникают упругие напряжения, которые могут значительно изменить атомную структуру и геометрию провода или контакта, вплоть до разрыва структуры, что впоследствии приводит к значительному изменению их механических и квантовых свойств [3,5]. Кроме того, сегодня активно изучаются свойства нанопроводов и наноконтактов, сформированных на различных немагнитных подложках, которые стабилизируют одномерные структуры при этом значительно изменяя их свойства. Провод, сформированный на подложке, является первым прототипом наноразмерной электронной схемы, поэтому изучение взаимодействий в системе «провод-подложка» является одним из приоритетных направлений наноэлектроники и спинтроники. Особо важным становится изучение упругих характеристик подложек и их механических свойств. Даже незначительные деформации подложки могут менять ее квантовые свойства и как следствие нарушать работу созданного устройства или всей схемы. В свою очередь деформация подложки может изменить квантовые свойства осажденного провода, а также привести к его разрыву. В связи с этим изучение атомных свойств свободных наноконтактов, нанопроводов и поверхностных одномерных систем необходимо не только для фундаментальной физики, но и для практического применения. На сегодняшний день уже опубликован ряд научных работ, в

которых сообщается о создании и исследовании свойств первых низкоразмерных устройств наноэлектроники и спинтроники на основе одномерных наноконтактов и нанопроводов. В связи с тем, что экспериментальное получение и исследование одномерных структур на сегодняшний день сопряжено с большими затратами и является трудоемким и ресурсоемким процессом, важным становится теоретическое исследование процессов и особенностей формирования свободных наноконтактов и нанопроводов, а также одномерных структур на поверхностях подложек. В данной работе было проведено теоретическое исследование влияния деформации одномерных систем (наноконтактов и нанопроводов) на их квантовые свойства, а также влияния деформаций подложки на квантовые и механические свойства поверхностных нанопроводов. В качестве подложек в работе были исследованы тонкие немагнитные металлические пленки (Ag, Au, Cu). Исследование взаимодействий в системе «провод-подложка» проводилось на примере Au-Mn смешанных нанопроводов, сформированных на поверхности медных пленок. В работе проведено комплексное исследование квантовых и механических свойств одномерных структур и немагнитных металлических подложек в рамках классической молекулярной динамики с помощью программного пакета LAMMPS и квантовой молекулярной динамики с помощью программного пакета VASP. Данный подход к решению задачи о свойствах наноразмерных систем является универсальным и приводит к значительному ускорению времени исследований без потери точности полученных величин.

1. Современное состояние исследований в данной области науки.

1.1. Механические и квантовые свойства свободных одномерных наноструктур (наноконтактов и нанопроводов)

На данный момент существует большое количество различных экспериментальных методов получения наноконтактов и нанопроводов. Все эти методы можно разделить на две основные группы: к первой группе относятся методы самоорганизации наноструктур [6]. При их использовании конечная конфигурация провода или наноконтакта определяется исключительно энергетическими характеристиками взаимодействия между атомами в системе при заданных внешних условиях. Ко второй группе методов можно отнести методы наноформирования [7,8,9], в которых формирование наноструктур происходит по средством манипулирования отдельными атомами. При использовании методов наноформирования возможно контролировать атомное строение и геометрию получаемых наноструктур. Однако, их использование требует дополнительного детального анализа стабильности получаемых наноструктур при изменении внешних условий, исследования их устойчивости к упругим деформациям и изучения их квантовых свойств.

К методам самоорганизации можно отнести метод формирования наноконтактов и нанопроводов с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). В процессе СТМ исследований наноконтакты и нанопровода могут спонтанно формироваться между зондом СТМ и исследуемой поверхностью в месте соприкосновения электродов (Рис. 1).

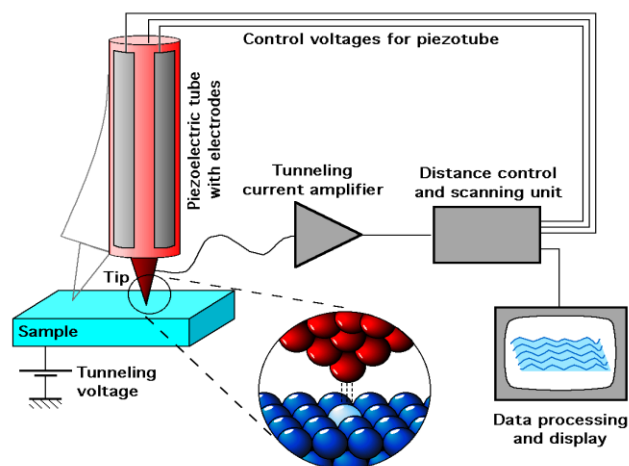


Рис. 1 Метод формирования наноконтактов с помощью сканирующего туннельного микроскопа.

На Рис. 2 схематично представлен процесс формирования контактов методом СТМ. Детальное исследование и предсказание возможных физических свойств наноконтактов, полученных методом СТМ, является важной задачей, как для теоретической, так и для экспериментальной физики, поскольку образование контактов происходит спонтанно и может привести к возникновению туннельного электронного транспорта через контакт, что способно исказить результаты проводимого эксперимента.

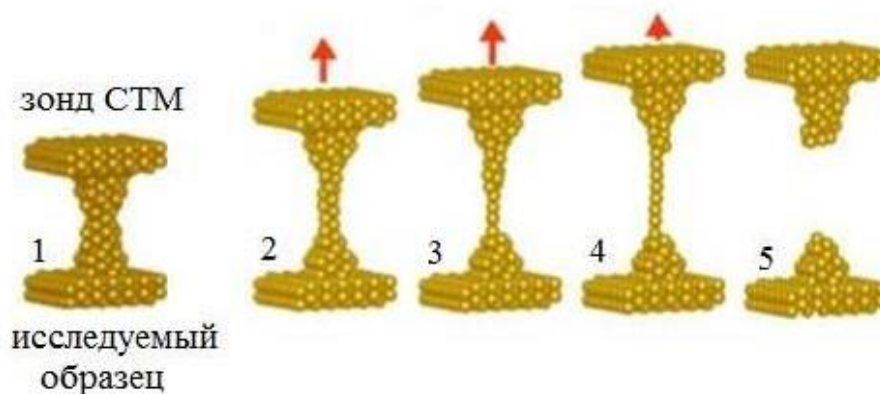


Рис. 2 Схема образования наноконтактов при работе с СТМ

К методам самоорганизации также относится метод механического контролируемого разрыва контакта (МКРК), при котором контакт формируется в местах разрывов цельных кристаллических массивов

[6,9,11,12] (Рис. 3). Метод МКРК относится к методам самоорганизационного формирования наноконтактов и нанопроводов, так как конечная структура контакта, а также его свойства определяются энергетическими характеристиками межатомного взаимодействия, и в значительной степени зависят от внешних условий проводимого эксперимента.

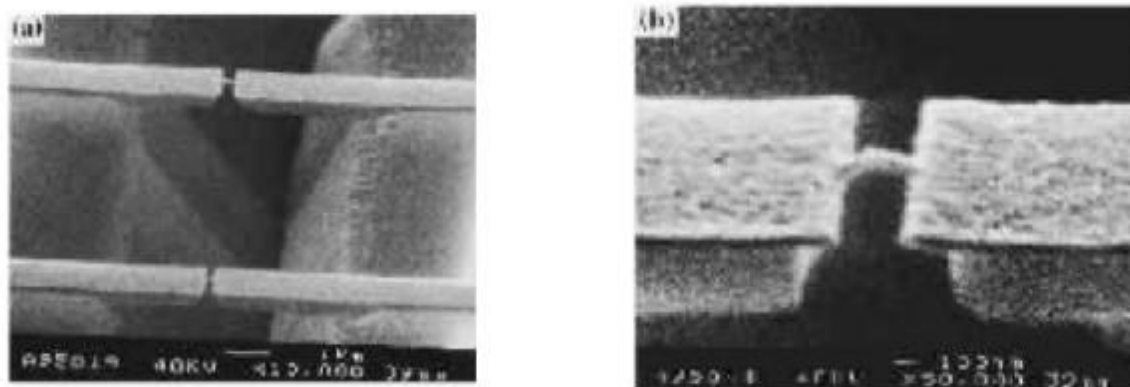


Рис.3 Формирование Au наноконтактов методом МКРК

1.2. Механические и квантовые свойства одномерных структур на поверхностях тонких металлических пленок.

Одним из успешных направлений миниатюризации наноэлектроники является использование в спинтронных устройствах считывания или перезаписи магнитной информации магнитных нанопроводов, формирующихся на немагнитных металлических, полупроводниковых или диэлектрических подложках. Так в 2012 году группа Andreas Heinrich of IBM Research Almaden (California) смогла считать бит информации с последовательности из 12 атомов железа на азотированной поверхности меди в области низких температур [10]. При комнатных температурах количество атомов в цепочке было увеличено до 150. Структура нанопровода была получена с помощью СТМ микроскопии. Далее методом СТМ ученым удалось считать бит информации с последовательности магнитных моментов, создав, таким образом, самый

маленький в мире магнитный накопитель данных. При этом особо следует отметить, что для записи информации используется 12-атомная антиферромагнитная цепочка на поверхности немагнитного образца, что важно, когда для хранения одного бита используется одновременно 12 атомов: Если в ферромагнетике (используемом в стандартных схемах хранения и записи информации) все атомы взаимодействуют между собой и для того, чтобы считать или записать информацию со структуры, необходимо изменение состояния спиновой поляризации всех атомов в области одного домена, поэтому нет возможности контролировать их независимо друг от друга, в антиферромагнитных цепочках можно разместить атомы очень близко друг к другу и считывать информацию с состояния намагничивания каждого атома. Особо важным в данной ситуации является стабилизация структуры из нескольких атомов в области комнатных температур, при этом обладающая магнитными свойствами. Данный эксперимент позволит в будущем создать память которую можно купить, и которая в 417 раз плотнее чем традиционная DRAM и примерно в 10000 раз плотнее SRAM.

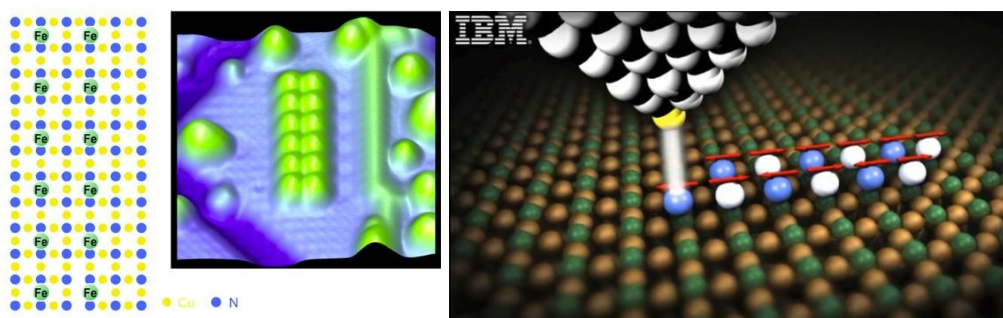


Рис.4 Структура из 12 атомов железа на азотированной поверхности меди CuN, полученная в IBM Lab's.

В описанном эксперименте IBM на поверхности CuN формируются железные цепочки, в которых в рамках представленного эксперимента удалось стабилизировать антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов атомов железа.

1.3. Механические и квантовые свойства тонких пленок.

Рабочие токи, пробойные явления, нескомпенсированные электромагнитные импульсы в нано- и микросхемах постепенно оказывают на них разрушающее действие. В разных частях системы постепенно будут накапливаться нескомпенсированные механические напряжения, которые могут привести как к полному разрушению наноразмерных схем и устройств, так и к возникновению в них малых упругих механических деформаций, которые, не разрушая систему в целом, приводят к изменению электронных свойств построенных на поверхностях подложек наноструктур (нанопроводов, квантовых точек). Даже незначительные деформации подложки могут привести к изменениям её проводящих свойств, что может критически изменить проводящие свойства наносхемы в целом. Механические деформации подложки также могут напрямую привести к разрушению поверхностных наносхем и изменению функциональности наноустройств. Поэтому исследование влияния механических упругих деформаций на стабильность и свойства низкоразмерных систем является наиболее значимой проблемой современной наноэлектроники и спинтроники. Особо следует отметить работу М.Лиу по изучению размерного эффекта и влиянию деформаций на рост и стабильность свинцовых нанопленок методом первопринципной молекулярной динамики [11]. В теоретической работе исследуется взаимосвязь между толщиной пленки и упругими константами (модуль Юнга, стресс) пленок, также проводится сравнение результатов расчета поверхностной энергии с экспериментальными данными.

Электронные свойства одномерных наноструктур сильно зависят от их атомной структуры и геометрии. Наноконтакты и нанопровода являются сильно неоднородными системами, которые характеризуются сильным неоднородным распределением упругих напряжений [12]. Максимальные напряжения сосредоточены непосредственно в месте контакта двух

электродов и по мере удаления вглубь электродов напряжение убывает. Такая сильная неоднородность не может не влиять на атомную структуру и, как следствие, на электронные свойства низкоразмерных систем. Поэтому даже малые деформации подложки могут привести к необратимым изменениям в функционировании наносхем, сформированных на ней, вплоть до полного разрушения системы. В работе Санкарнараянана и др. было проведено исследование стабильности смешанных нанопроводов Pd-Pt относительно внешних механических воздействий, также в их работе была обнаружена сильная зависимость механических свойств Pd-Pt наноконтактов от температуры и компонентного состава [13]. Особое место в данной области занимает прямое исследование зависимости квантовых свойств наноразмерных структур (нанопленок, нанопроводов, нанокластеров) от упругой деформации подложки, и как следствие самого наноразмерного объекта.

2. Модель и метод исследования

2.1 Метод молекулярной динамики и традиционные представления статистической физики.

С точки зрения квантовой механики динамика многоатомной системы в нерелятивистском приближении может быть описана уравнением Шредингера с функцией Гамильтона вида

$$H = \sum_i \frac{\bar{p}_i^2}{2M_i} + \sum_a \frac{\bar{p}_a^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{e^2}{|\bar{r}_\alpha^{el} - \bar{r}_\beta^{el}|} - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha} \frac{Z_i e^2}{|\bar{r}_i - \bar{r}_\alpha^{el}|} \quad (1),$$

содержащем члены, соответствующие кинетической энергии ядер и электронов и кулоновской энергии и их взаимодействия. С формальной точки зрения на данном уровне описания полная информация о системе содержится в волновой функции

$$\Psi = (\{\bar{r}_i\}, \{\bar{r}_\alpha^{el}\}, t) \quad (2),$$

которая в свою очередь является решением дифференциального уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (3).$$

При решении задачи о нахождении основного состояния системы (системы дифференциальных уравнений) большого числа частиц (атомов) появляется необходимость использования значительного количества численных ресурсов и большого количества времени, что приводит к необходимости построения приближенных методов исследования [14]. В настоящее время исследования межатомного взаимодействия на основе решения квантово-механических уравнений для электронной подсистемы возможны лишь для систем с небольшим числом частиц (до нескольких сотен). Поэтому более актуальным становится предварительное моделирование атомной структуры системы, методами классической молекулярной динамики, и уже на следующем этапе изучение методами

квантовой молекулярной динамики характерных квантовых свойств исследуемых наносистем (магнетизм, проводимость), атомная структура которых была получена методами КМД. Методы КМД позволяют оперировать системами, состоящими из 1000 и более атомов, при этом исследование атомной структуры (релаксация) системы не требуют больших временных затрат. В методах КМД динамика N взаимодействующих атомов может приближенно описываться системой классических уравнений движения

$$m_i \frac{d^2 \bar{r}_i}{dt^2} = \bar{F}_i(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N), \quad i = 1, \dots, N, \quad (4)$$

или

$$m_i \frac{d\bar{v}_i}{dt} = \bar{F}_i(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N), \quad \frac{d\bar{v}_i}{dt} = \bar{v}, \quad (5)$$

где m_i , \bar{r}_i и \bar{v}_i – масса, координата и скорость i -ой частицы, $i=1, \dots, N$,

сила действующая на нее, определяется как

$$\bar{F}_i(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) = - \frac{\partial U(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N)}{\partial \bar{r}_i}, \quad (6)$$

где функция U обуславливает физические свойства исследуемой системы и задается исходя из определенных теоретических моделей. В МД расчетах больших систем используются классические потенциалы взаимодействия. В простейших случаях достаточно учитывать лишь эффективный парный вклад в энергию взаимодействия.

При определении конкретного типа функции U зачастую стремятся учесть результаты квантово-механических моделей. В некоторых случаях функция U находится полностью эмпирически из условия соответствия набора характеристик модели экспериментальным данным и/или результатам квантово-механических расчетов. При этом некоторые свойства веществ

могут быть с одинаковой точностью описаны не одним, а целым семейством потенциалов.

Для интегрирования уравнений движения используется метод Верле в скоростной форме. Аппроксимационная схема этого метода более устойчива, точнее на порядок в сравнении со схемой наиболее простого метода Эйлера и широко используется, в частности, при моделировании динамики частиц, равно как и почти идентичный метод с перешагиванием (leapfrog method). Интегрирование заключается в последовательном повторении шагов, каждый из которых состоит из четырёх частей:

$$\bar{v}_i(t + \Delta t/2) = \bar{v}_i(t) + \bar{a}_i(t)\Delta t/2. \quad (7)$$

$$\bar{r}_i(t + \Delta t) = \bar{r}_i(t) + \bar{v}_i(t + \Delta t/2)\Delta t. \quad (8)$$

$$\bar{v}_i(t + \Delta t) = \bar{v}_i(t + \Delta t/2) + \bar{a}_i(t + \Delta t)\Delta t/2. \quad (9)$$

При выборе шага интегрирования Δt нужно учитывать такую физическую характеристику системы, как максимальная частота колебаний, возникающих в ней. Другое физическое ограничение обусловлено тем, что энергия взаимодействия должна мало меняться на длине, на которую смещаются частицы за время Δt . Эта характеристика не усредненная, а касается каждой частицы. В связи с этим может использоваться переменный шаг. МКМД можно отнести к компьютерным экспериментам, т.е. к численным методам, которые можно разделить на две части: экспериментальную установку и средства диагностики. Действительно, решение по численным схемам (7)-(9) или любой иной дает нам исчерпывающие сведения о траекториях частиц, т.е. полностью определяет исследуемую систему – это есть аналог экспериментальной установки.

Важным преимуществом данной работы является комплексный подход к изучению квантовых и атомных свойств низкоразмерных систем. В работе проводится многоуровневое исследование наноструктур, совмещающее на

первом этапе изучение атомной структуры наносистем методом классической молекулярной динамики, реализованным в программном коде LAMMPS, и на втором изучение квантовых свойств и расчет упругих характеристик тонких пленок и одномерных наноконтактов и нанопроводов методом первопринципной молекулярной динамики, реализованном в программе VASp. Метод молекулярной динамики — широко используемый численный метод, использующий те или иные схемы интегрирования соотношений классической механики для точечных частиц, поле взаимодействий между которыми определено. Метод позволяет рассматривать процессы в детализированном виде и в настоящее время зачастую заменяет или дополняет натуральный эксперимент, в котором, к примеру, почти всегда невозможно рассматривать эволюцию атомарной структуры в динамическом режиме.

Температуру частиц можно определить, рассчитав их среднюю кинетическую энергию или по распределению частиц по энергиям(скоростям). Совпадение между собой результатов этих двух способов говорит о том, что в системе установилось равновесие по этому параметру (система релаксирована).

Для расчетов, представленных в данной работе, используется программа LAMMPS, в которой реализован метод КМД. Для расчетов используются потенциалы базы Material Measurement Laboratory. Этот сайт является источником различных потенциалов (силовых полей), связанных с ними файлов и инструментов оценки, которые помогают исследовать межатомные модели и судить об их качестве и применимости. Потенциал, используемый в работе, представляет собой модель погруженного атома (Embedded atom model, сокращенно eam), которая используется для описания энергии взаимодействия между двумя атомами в системе. Метод погружённого атома основан на теории функционала локальной плотности. В рамках данного потенциала каждый атом представляется расположенным в

почти однородный электронный газ. А энергия, связанная с добавлением атома в систему, входит как составная часть в выражение для полной энергии системы. Как показано в работе Нормана [14], плотность неоднородного электронного газа можно заменить приближением, суть которого заключается в использовании суперпозиции атомных плотностей. Это приближение хорошо работает для переходных металлов с почти заполненной d-оболочкой, например никель, медь, серебро и др. В моделировании потенциальная энергия i -го атома определяется так

$$E_i = F_\alpha(\sum_{i \neq j} \rho_\alpha(r_{ij})) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi_{\alpha\beta}(r_{ij}), \quad (10)$$

где r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами, $\varphi_{\alpha\beta}$ – функция парного потенциала, ρ_α – вклад в плотность заряда электронов от j -го атома вместе расположения i -го атома и F – это функция «погружения», которая представляет энергию, необходимую для помещения i -го атома в электронное облако. Метод EAM является многочастичным потенциалом и, поскольку плотность электронного облака — это сумма вклада от большого количества атомов, на практике для уменьшения сложности и, соответственно, времени расчетов, часто ограничивают количество соседей.

В LAMMPS используется алгоритм Нозе-Гувера для моделирования молекулярной динамики при постоянной температуре и давлении. Влияние термостата на частицы исследуемой системы описывается, при помощи неконсервативных сил, зависящих от импульсов виртуальных частиц. Гамильтониан системы:

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{m_i}{2} |p_i|^2 + U(r) + \frac{\zeta^2 Q}{2} + 3Nk_B T \ln s \quad (11)$$

где s -дополнительная степень свободы для теплового резервуара; $p_i = m_i v_i \times s$; ζ -коэффициент трения; Q -эффективная «масса» теплового резервуара.

2.2 Теория функционала электронной плотности

Теоретическое исследование квантовых свойств одномерных нанопроводов проводится при помощи первопринципного кода VASP, использующего теорию функционала электронной плотности. Данная теория включает в себя ряд приближений, позволяющих перейти от представления наблюдаемых системы через волновые функции (ВФ) к представлению наблюдаемых через электронную плотность системы.

В работе изучаются атомные системы типа металл. Система состоит из положительно заряженных атомных остовов, находящихся в узлах кристаллической решётки, окружённых отрицательно заряженными электронами, перемещающимися в периодическом потенциале решётки. Гамильтониан такой системы выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}, \quad (12)$$

Два первых слагаемых отвечают кинетическим энергиям свободных иона и электрона соответственно, следующие определяют энергии электрон-ионного, электрон-электронного и ион-ионного взаимодействий соответственно.

Число Z_i , по своему определению, отвечает числу протонов в i -ом ядре и, следовательно, числу электронов. В случае, когда рассматривается N ионов, число электронов составит ZN (в простейшем случае, когда представлены атомы только одного элемента). Как известно из курса квантовой механики, уравнение Шрёдингера может быть решено точно только для случая атома водорода с одним электроном. Для более сложных случаев необходимо вводить приближения.

Первое приближение для данной системы было предложено Борном-Оппенгеймером и состоит в том, что ввиду сильного различия между массами ионов и электронов, можно считать, что ионы практически

неподвижны, и электроны движутся между неподвижными ионами в создаваемом ими потенциале. Вид гамильтониана существенно упрощается, и записывается, как

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_i|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (13)$$

Однако, и для решения этой системы необходимо вычислить $\sim 10^{150}$ параметров.

Основные положения теории функционала электронной плотности вводятся в теории Томаса-Ферми [15]. Любая молекулярная или кристаллическая структура в данной теории представляется в виде электронной жидкости с включёнными в неё ионами. Идея теории функционала плотности заключается в сведении многочастичной задачи к одночастичной задаче в эффективном потенциале. При этом вместо многочастичных волновых функций используется одна переменная – электронная плотность. Метод Томаса-Ферми – метод нахождения электронной плотности непосредственно из потенциала без предварительного нахождения волновых функций, которые являются решениями выше представленного многочастичного уравнения Шредингера. Так полная кинетическая энергия неоднородного электронного газа вводится формулой:

$$T = C_k \int dr [n(r)]^{\frac{5}{3}} \quad (14)$$

и становится функционалом электронной плотности. Для потенциала электрон-нуклонного взаимодействия в системе имеем:

$$U_{en} = \int dr n(r) V_N(r) \quad (15)$$

При этом потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электронов будет соответствовать формула (формула Хартри):

$$U_{ee} = \frac{1}{2} e^2 \int dr dr' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} \quad (16)$$

Полная энергия системы (без учёта обменного взаимодействия и корреляции) представима в виде:

$$U_{electr} = T + U_{en} + U_{ee} \quad (17)$$

Пусть теперь взаимодействующие электроны движутся во внешнем потенциале v . Энергия электронов, связанная с потенциалом v , также может быть выражена через электронную плотность системы:

$$U_{ext} = \int dr n(r)v(r) \quad (18)$$

Используя метод неопределённых множителей Лагранжа, потребуем, чтобы выражение для полной энергии имело минимум. Для этого необходимо решить вариационную задачу:

$$\begin{cases} \delta(E - \mu N) = 0 \\ \int dr n(r) = N \end{cases} \quad (19)$$

где μ – химический потенциал системы.

Решение системы даёт уравнение Томаса-Ферми:

$$\frac{5}{3}C [n(r)]^{\frac{2}{3}} + \int dr dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} + v(r) - \mu = 0 \quad (20)$$

Теория Томаса-Ферми с достаточной точностью описывает некоторые качественные характеристики, такие как полные энергии атомов, но в вопросах химии и материаловедения, включающих рассмотрение валентных электронов, она может давать ошибочные результаты, например, из нее не следует наличие химической связи. В то же время теория Томаса-Ферми, несмотря на свою простоту и явные дефекты, формулирует крайне важный вывод: электронная плотность может полностью характеризовать систему.

Теория функционала электронной плотности (ТФП) - Density Functional Theory(DFT) - теория ТФ, развитая и доработанная Коэнбергом и Коном. Впоследствии Кон за её разработку был удостоен Нобелевской премии по

химии в 1998 г. Основным нововведением в теории, является утверждение, что все свойства электронной структуры в невырожденном состоянии полностью определяются её электронной плотностью.

$$n(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j|^2 \quad (21)$$

В теории функционала плотности между электронной плотностью и волновой функцией основного состояния устанавливается взаимно однозначное соответствие.

Первое положение теоремы Коэнберга и Кона состоит в том, что плотность основного состояния связанной системы взаимодействующих электронов в некотором внешнем потенциале $v(r)$ однозначно определяет этот потенциал.

Замечания:

1. Термин «однозначно» здесь означает «с точностью до не представляющей интереса аддитивной константы».

2. В случае вырожденного основного состояния положение относится к плотности любого основного состояния.

3. Положение является математически строгим.

2.3 Уравнения Кона-Шэма

После публикации работы Томаса и Ферми был разработан ряд самосогласованных уравнений для исследования электронной структуры атомов. Система включала в себя одночастичное уравнение Шрёдингера:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_H(r) \right\} \phi_j = \epsilon_j \phi_j \quad (22)$$

где $v_H(r)$ определяется как:

$$v_H(r) = -\frac{Z}{r} + \int dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} \quad (23)$$

Первое слагаемое представляет собой энергию кулоновского взаимодействия между электроном и атомным ядром, а второе определяет взаимодействие с распределением средней электронной плотности. С добавлением условия Коэнберга и Кона получается самосогласованная система уравнений, которая с помощью последовательных итераций позволяет вычислить значение электронной плотности основного состояния $n(r)$.

Затем в 1964 году Вальтер Кон и Лу Шэм попытались совместить теорию Хоэнберга-Кона и метод Хартри-Фока. В работе Хоэнберга-Кона для функционала энергии была приведена следующая формула:

$$E_v[\Psi] = \int dr v(r)n(r) + F[n] \quad (24)$$

Однако теперь функционал $F[n]$ был определён как:

$$F[n(r)] \equiv T_s[n(r)] + \frac{1}{2} \int dr dr' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} + E_{xc}[n(r)] \quad (25)$$

где $T_s[n]$ – функционал кинетической энергии невзаимодействующих электронов, второй член отвечает за кулоновское взаимодействие электронов между собой, а $E_{xc}[n]$ – функционал обменного взаимодействия системы.

Используя условие $\int dr \delta n(r) = 0$, было получено уравнение:

$$\delta E_v[n(r)] = \int dr \delta \tilde{n}(r) \left\{ v_{eff}(r) + \frac{\delta}{\delta \tilde{n}(r)} T_s[\tilde{n}(r)]|_{\tilde{n}(r)=n(r)} - \epsilon \right\} = 0 \quad (26)$$

где

$$v_{eff}(r) \equiv v(r) + \int dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} + v_{xc}(r), \quad (27)$$

$$v_{xc}(r) = \frac{\delta}{\delta \tilde{n}(r)} E_{xc}[\tilde{n}(r)]|_{\tilde{n}(r)=n(r)} \quad (28)$$

Для данных $v_{eff}(r)$ и $v_{xc}(r)$ может быть составлено уравнение Шрёдингера:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{eff}(r) - \epsilon_j \right\} \phi_j = 0 \quad (29)$$

решение которого обеспечивает минимум $n(r)$ при выполнении (21).

Уравнения (21), (28)-(29) составляют систему уравнений Кона-Шэма, решение которой проводится самосогласованно по схеме на рис.5.

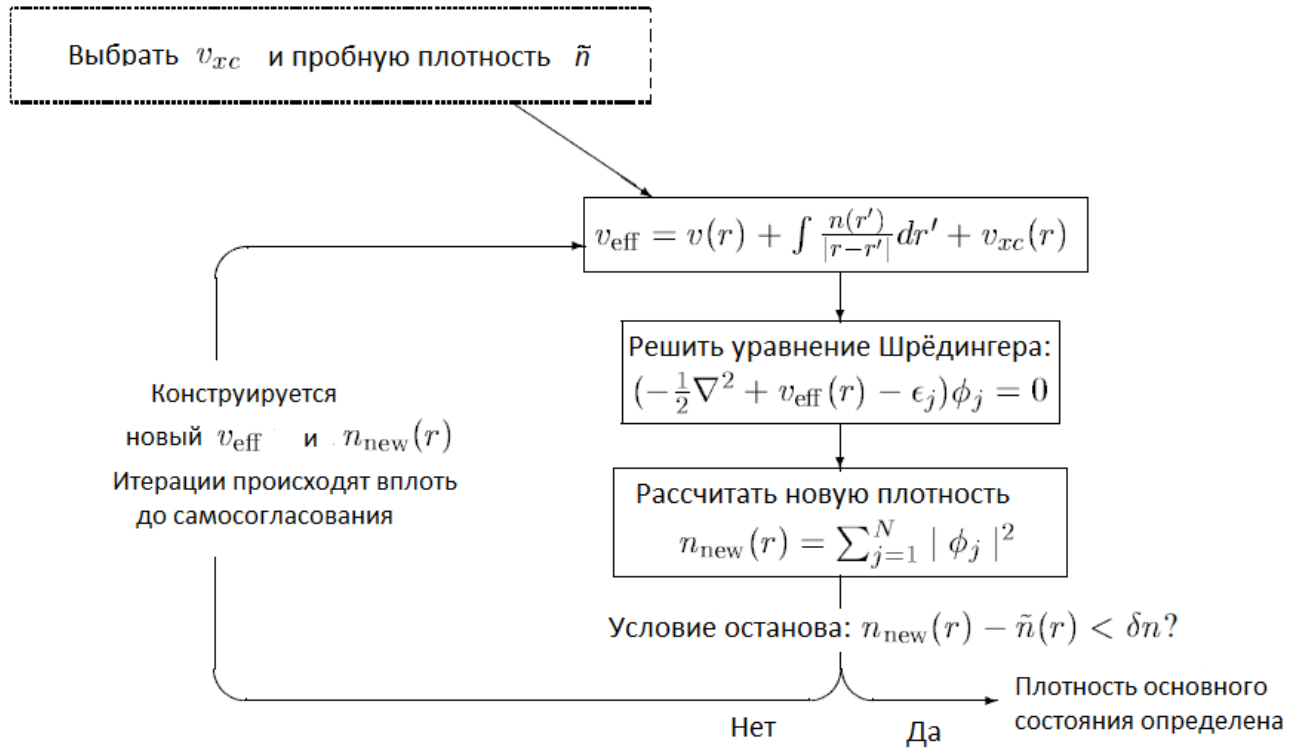


Рис. 5. Схема решения системы уравнений Кона-Шэма.

Существует много методов нахождения электронной плотности, минимизирующей функционал полной энергии, то есть реализующей основное состояние системы. Когда найдено приближение для обменно-корреляционной плотности, получается набор одноэлектронных уравнений Кона-Шэма. Для того, чтобы найти волновые функции электронов и собственные значения энергии, необходимо разложить их по какому-либо базису и определить коэффициенты разложения из решения уравнений Кона-Шэма. Когда согласование достигнуто, вычисляется электронная плотность системы и полная энергия.

2.4 Расчет сил в элементарной ячейке

После того, как определена электронная плотность основного состояния и вычислена полная энергия системы, вычисляются силы в элементарной ячейке по теореме Гельмана-Фейнмана:

$$\begin{aligned}\vec{F} = -\nabla E_0 &= \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \langle \Psi_0 | H(\vec{R}) | \Psi_0 \rangle = \langle \nabla \Psi_0 | H(\vec{R}) | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \nabla H(\vec{R}) | \Psi_0 \rangle + \\ &+ \langle \Psi_0 | H(\vec{R}) | \nabla \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \nabla H(\vec{R}) | \Psi_0 \rangle\end{aligned}\quad (30)$$

Здесь $|\Psi_0\rangle$ волновая функция основного состояния.

После того, как силы, действующие на ионы, будут рассчитаны, ионы перемещаются в направлении действия силы, чтобы создать структуру с меньшей энергией. Когда ионы переместятся, структура, безусловно, изменится, и тогда должен быть рассчитан новый набор электронных волновых функций. Новые электронные волновые функции приводят к новой энергии основного состояния и новым силам, действующим на ионы. Данный цикл будет повторяться, пока силы не станут меньше некоторого выбранного значения.

Все вычисления, проведенные в рамках квантовой механики, в данной работе были произведены с использованием первопринципного кода VASP. Слово первопринципный (ab-initio) означает, что при проведении расчётов задействуются первые принципы квантовой механики (уравнение Шрёдингера). Основой VASP является теории функционала электронной плотности, в также нём содержится необходимая для вычислений база псевдопотенциалов. Кроме того, VASP обладает большим количеством регулируемых опций, включая различные алгоритмы минимизации, методы интерполяции и релаксации.

2.6 Описание модели

В данной работе проводилось исследование атомной структуры и магнитных свойств одномерных нанопроводов с использованием первопринципного кода VASP.

Для проведения расчётов было использовано обобщённое градиентное приближение (GGA) обменно-корреляционного взаимодействия, так как оно более точно описывает квантовые свойства систем с сильно неравномерным распределением электронной плотности, чем приближение локальной плотности (LDA). В особенности это касается расчётов магнитных свойств, где использование LDA может привести к серьёзным ошибкам.

Моделью исследуемой системы, используемой при вычислениях, является так называемая *суперячейка*. *Суперячейка* используется для значительного уменьшения времени вычислений и представляет собой область виртуального пространства, в которой располагается часть теоретически исследуемой системы, обладающая всей совокупностью свойств, характерных всей исследуемой системе. При этом важно, чтобы часть системы, содержащаяся в суперячейке была такой, чтобы вся исследуемая система могла быть получена из последней некоторым количеством трансляций. В первопринципном коде VASP в качестве условия трансляции используются граничные условия Борна-Кармана:

$$\Psi(\vec{r} + \vec{T}) = \Psi(\vec{r}) \quad (31)$$

где $\vec{T} = \sum_{i=1}^3 N_i \vec{a}_i$, \vec{a}_i – векторы элементарной трансляции в направлениях x, y, z, N_i – набор натуральных чисел.

В этом случае суперячейка фактически транслируется на всё виртуальное пространство, что даёт возможность сделать суперячейку достаточно малой и, тем самым, значительно уменьшить время вычисления, а во многих случаях – сделать его в принципе реальным. С другой стороны,

суперячейка должна быть достаточно большой, чтобы исключить взаимодействие атомов со своими образами. Ввиду того, что длина затухания волновой функции составляет порядка 6Å , рекомендуемый размер ячейки составляет 10Å . В данной работе были использованы суперячейки с размерами от 15Å до порядка 25Å в зависимости от конкретной задачи.

Расчеты в рамках классической молекулярной динамики проводились с помощью программного кода LAMMPS, описанного выше.

2.6 Цель исследования

Развитие современной наноэлектроники позволяет создавать принципиально новые наноустройства и наноразмерные электронные схемы, однако данный процесс является достаточно трудоёмким и дорогостоящим, кроме того полученные в результате образцы не всегда обладают достаточной устойчивостью и стабильностью в отношении внешних воздействий. Поэтому предварительное изучение механических и квантовых свойств различных наноструктур является важным процессом в области нанотехнологий. Не менее важной задачей становится изучение влияния механических деформаций на свойства системы и ее стабильность. Комплексный подход, заключающийся в совместном использовании методов первопринципной молекулярной динамики и классической молекулярной динамики, позволяет исследовать процессы формирования наноструктур, изучить взаимосвязь между механическими и квантовыми свойствами данных систем, что и стало основной целью настоящей работы.

Основной целью данной работы является комплексное исследование механических свойств металлических свободных одномерных нанопроводов и наноконтактов, изучение процесса формирования одномерных наноструктур, исследование их квантовых свойств в зависимости от геометрии структуры, а также изучение механических свойств одномерных нанопроводов на немагнитных металлических подложках, изучение

механических свойств тонких металлических подложек (наноразмерных пленок), исследование влияния деформаций на свойства подложек (пленок), а также на квантовые свойства нанопроводов на поверхностях подложек с использованием описанного выше комплексного подхода к изучению квантовых и механических свойств низкоразмерных систем. Расчеты проводились с применением программного кода Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) работающего в рамках квантовой механики и молекулярного кода LAMMPS, основанного на методах классической механики. В работе было проведено изучение основных особенностей атомной структуры нанопроводов, наноконтактов и нанопленок при их формировании и росте с образованием устойчивой химической связи, особенностей изменения их свойств в зависимости от геометрии и химического (элементного) состава структуры с учётом приложенных напряжений (растяжений или сжатий). Основное внимание было уделено исследованию влияния деформаций на свойства смешанных (многокомпонентных) металлических нанопроводов, образованных из 3d- и 5d- металлов, как свободных, так и на поверхностях подложек.

3. Результаты

3.1 Исследование атомной структуры, геометрии и процессов формирования одномерных наноструктур (НП и НК).

Первой задачей настоящей работы было изучение процессов формирования одномерных наноструктур, исследование изменений их атомной структуры и геометрии в процессе роста, а также расчет деформаций, возникающих в процессе формирования свободных наноконтактов и нанопроводов. Также целью работы было исследование влияния возникающих в процессе формирования и роста провода деформаций на его квантовые свойства. В работе было проведено моделирование процессов формирования золотых и медных наноконтактов методом контролируемого разрыва с помощью алгоритма классической молекулярной динамики, реализованного в программном коде LAMMPS. В результате проведенного исследования было выделено несколько основных этапов изменений атомной структуры контакта, возникающих в процессе его формирования (Рис.6). Первый этап - толстый контакт с омической проводимостью с сечением в несколько сотен атомов. Второй этап – квазиодномерный нанокontakt с переходным характером проводимости, в котором возникают квантовые размерные эффекты. Третий этап – одномерный атомный контакт с квантовым характером проводимости, в баллистическом режиме. Основное внимание было уделено последнему этапу непосредственно перед разрывом контакта. Нами было показано, что в независимости от скорости растяжения толстого провода и температуры среды непосредственно перед разрывом цепи золотого контакта формируется трехатомная изолированная атомная цепочка между двумя массивами золотых электродов. Данный расчет хорошо согласуется с результатами экспериментальной работы Ониши и др. [7]. Кроме того в работе было обнаружено появление области текучести при растяжении толстого провода, которая соответствует моменту образования в структуре массива зародышей

необратимых изменений его атомной структуры, приводящих в результате к формированию атомного наноконтакта между золотыми электродами.

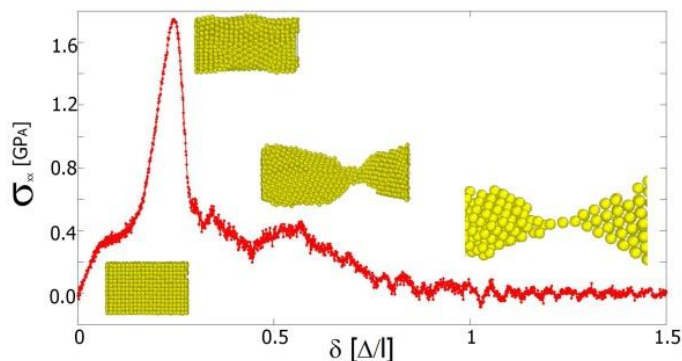


Рис. 6 График зависимости напряжения от удлинения золотого провода со скоростью деформации 10^9c^{-1} .

Для детального анализа изменения атомной структуры на последнем перед разрывом этапе формирования наноконтакта было проведено первопринципное исследование его атомной структуры и геометрии с помощью программного кода VASp. Был проведен точный расчет сил и критических деформаций НК. Исследование атомной структуры цепи контакта на последнем этапе показало наличие трех конфигураций цепи контакта перед разрывом: сначала формируется структура двух золотых

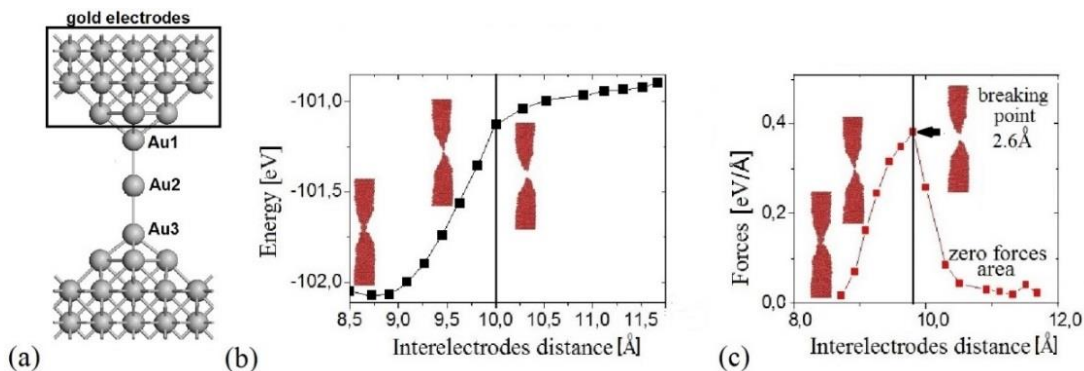


Рис.7 Модель короткого золотого НК для DFT расчета (а), полная энергия золотого НК как функция от межэлектродного расстояния (б), межатомные силы в золотом НК как функция от межэлектродного расстояния (с).

проводов между золотыми электродами, при дальнейшем растяжении происходит вытягивание одного атомного провода с конфигурацией «зиг-

заг», и непосредственно перед разрывом формируется линейный трехатомный провод между золотыми электродами. Критическое значение силы, приводящей к разрыву контакта, $0,4\text{эВ/А}$ (Рис.7). Разрыв контакта соответствует расстоянию между электродами $9,8\text{А}$, что хорошо согласуется с результатами экспериментальных и теоретических работ [16].

Так же в работе было проведено моделирование процесса формирования методом контролируемого разрыва контакта для медного образца. Расчет показал, что на последнем этапе перед разрывом контакта при комнатной температуре не формируется длинных цепей, в нашем исследовании было получено формирование одноатомной цепи между медными электродами перед разрывом цепи наноконтакта (Рис.8). Таким образом в работе была обнаружена взаимосвязь между компонентным составом контакта и процессом его формирования и роста. Данный результат также согласуется с результатами аналогичных теоретических исследований [17].

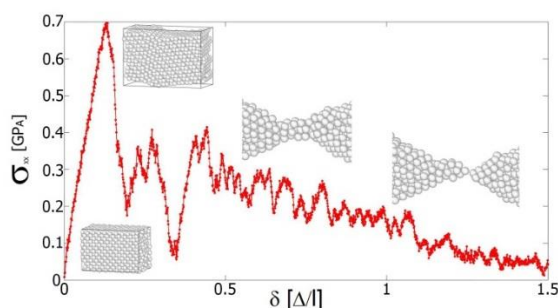


Рис. 8 График зависимости напряжения от удлинения медного провода со скоростью деформации 10^9с^{-1} .

В настоящей работе показано, что при формировании методом контролируемого разрыва в наноконтактах из благородных металлов формируются длинные атомные нити между электродами, что ссогласуется с результатами ряда экспериментальных и теоретических работ [8,9,16]. Так как для длинных цепей между электродами основные свойства системы должны зависеть от внутрицепочечных взаимодействий и лишь в

незначительной степени от взаимодействия с электродами в работе было проведено исследование свойств нанопроводов, которые являются хорошим приближением длинных наноконтактов, не учитывающих влияния массивных электродов на свойства системы. Как показали исследования многих теоретических групп данная модель контакта является достаточно точной при изучении квантовых свойств одномерных систем [18]. В связи с тем, что основной целью исследований являлось выделение стабильных и устойчивых к внешним воздействиям и деформациям, магнитных нанопроводов, пригодных для нужд спинтроники, то в настоящей работе в рамках квантово-механических вычислений были исследованы свойства смешанных нанопроводов. В качестве системы для исследований была выбрана одномерная система из атомов благородных металлов Pt и переходных элементов Mn. Pt была выбрана как элемент, повышающий устойчивость и стабильность провода [19]. Дело в том, что у платины строение внешних атомных орбиталей аналогично золоту, которое в соответствии с нашими расчетами позволяет формировать наиболее длинные атомные цепочки между электродами и при этом обладает достаточной эластичностью, так как разрыв золотого наноконтакта или нанопровода наступает при относительной деформации 22%. Кроме того известно, что платина способна намагничиваться в наноструктурах при взаимодействии с магнитными атомами [18]. Mn выбран как элемент, обладающий в наноразмерном состоянии необычными магнитными свойствами [20]. В соответствии с результатами предшествующих теоретических исследований смешанных биметаллических нанопроводов в настоящей работе для изучения взаимосвязи между магнитными и структурными свойствами системы были выбраны равномерно смешанные нанопровода [21]. С помощью первопринципного кода VASP была изучена атомная структура смешанного Pt-Mn нанопровода. Исследование обнаружило наличие тех же характерных этапов изменения геометрии провода, что и в однокомпонентных золотых наноконтактах при растяжении или сжатии

одномерных систем. Сжатый нанопровод находится в конфигурации «зиг-заг», сильное сжатие переводит провод в систему двух взаимодействующих нанопроводов (Pt и Mn нанопроводов). Растянутый нанопровод принимает линейную конфигурацию с равномерным чередованием атомов в проводе.

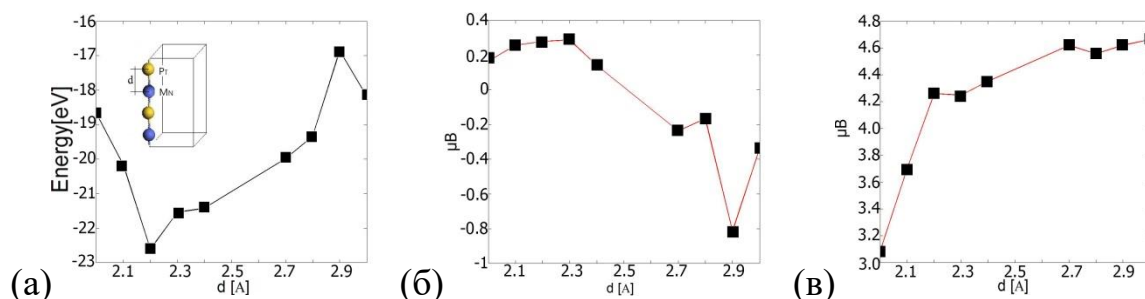


Рис. 9 График зависимости энергии (а), магнитного момента Pt (б) и магнитного момента Mn (в) от расстояния между атомами.

Для системы одномерного Pt-Mn нанопровода было проведено исследование магнитных свойств провода в зависимости от геометрии и атомной структуры. Исследование магнитных свойств показало, что провод является магнитным, магнитный момент атомов марганца при сжатии провода и переходе его в конфигурацию «зиг-заг» уменьшается монотонно от постоянного значения $4,4\mu_B$ в линейном проводе, до значения $3,2\mu_B$ для системы двух взаимодействующих проводов. Наиболее интересные результаты были получены при расчете магнитных моментов атомов Pt. В работе обнаружен переход провода из состояния ферромагнетика в состояние антиферромагнетика в отношении магнитных моментов атомов платины при растяжении или сжатии нанопровода. Однако, следует отметить, значения локальных магнитных моментов атомов Pt на порядок меньше, чем у атомов Mn и составляют величину порядка $0,2\mu_B$ - $0,8\mu_B$, что возможно связано с орбитальным характером намагниченности у платины в проводе.

3.2 Изучение влияний деформаций на атомную структуру тонких пленок.

Основной задачей исследования было изучение возможности стабилизации одномерных структур (нанопроводов и наноконтактов) на поверхностях металлических подложек, а также изучение влияния деформации подложки на свойства поверхностных одномерных наноструктур. С этой целью первоначально были изучены механические свойства тонких металлических пленок для изучения влияния деформации подложки на одномерные поверхностные системы. В работе были изучены механические свойства Au, Ag и Cu тонких пленок.

На рисунке 10 представлен график зависимости продольного напряжения от относительной продольной деформации пленки. На графике видно наличие у тонких пленок характерных для кристаллического массива этапов деформационных изменений: области упругости, область пластичности и область механического разрушения пленки. Расчеты были проведены методом классической молекулярной динамики с помощью программы LAMMPS. Для проверки наших расчетов были рассчитаны модули Юнга для кристаллических массивов меди, золота и серебра и сравнены с экспериментальными значениями. Для меди $E=124$ Гпа, для золота $E=78$ Гпа, для серебра $E=83$ Гпа.

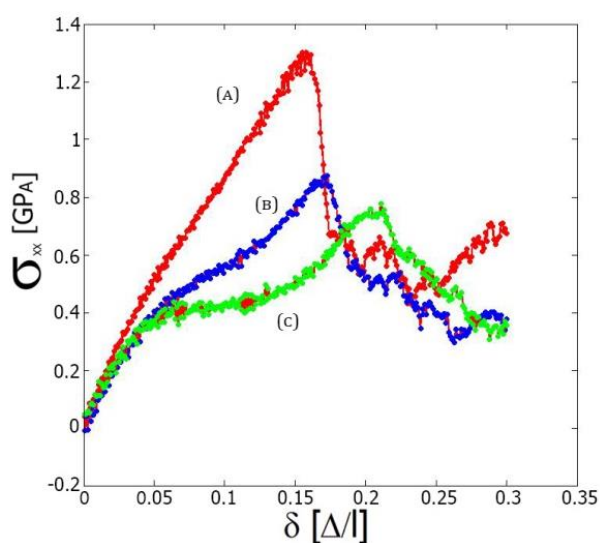


Рис. 10 График зависимости напряжения от удлинения медной (а), серебряной (б) и золотой (в) пленок.

В работе были рассчитаны критические значения напряжений и сил, при которых в пленке начинается формирование ядер необратимых деформаций, приводящее к разрушению поверхностного атомного слоя. Как показали расчеты, значение критических значений продольных напряжений, при которых происходит необратимое искажение поверхности подложки, в значительной степени зависит от компонентного состава подложки (металлической пленки). Значения критических продольных напряжений для Au - 0.7ГПа, для Cu - 1.3ГПа, для Ag - 0.8ГПа. Все расчеты были проведены при комнатной температуре. Кроме того, для серебряной и золотой подложек (пленок благородных металлов) обнаружено появление области с нулевым значением модуля Юнга, то есть области текучести материала в наноразмерных пленках. Появление области текучести связано с перестройками атомной структуры в объеме пленок. Аналогичной области в медных пленках не обнаружено. Возникновение области текучести в пленках благородных металлов приводит к появлению в зависимости напряжения от относительного удлинения своеобразного пика, после которого следует разрушение поверхностного слоя металлической пленки.

Следующей частью работы стало изучение зависимости механических свойств пленки от ее толщины. С этой целью в работе были построены зависимости продольного напряжения от относительной деформации для пленок меди и серебра, состоящих из 2, 4, 6, 8, 10, 12 и 16 атомных монослоев, что соответствует толщинам 0.2, 0.6, 1.0, 1.4, 1.8 и 3.1нм, соответственно. Исследование механических свойств в зависимости от толщины, проведенное для серебряной пленки, показало сглаживание зависимости и исчезновение области текучести при увеличении толщины пленки. Переходной толщиной пленок, при которой исчезает квантовый размерный эффект (текучесть материала), является пленка из 10 атомных слоев. Кроме того, обнаружено смещение пика продольных напряжений, характерных для тонких пленок в область низких удельных растяжений с

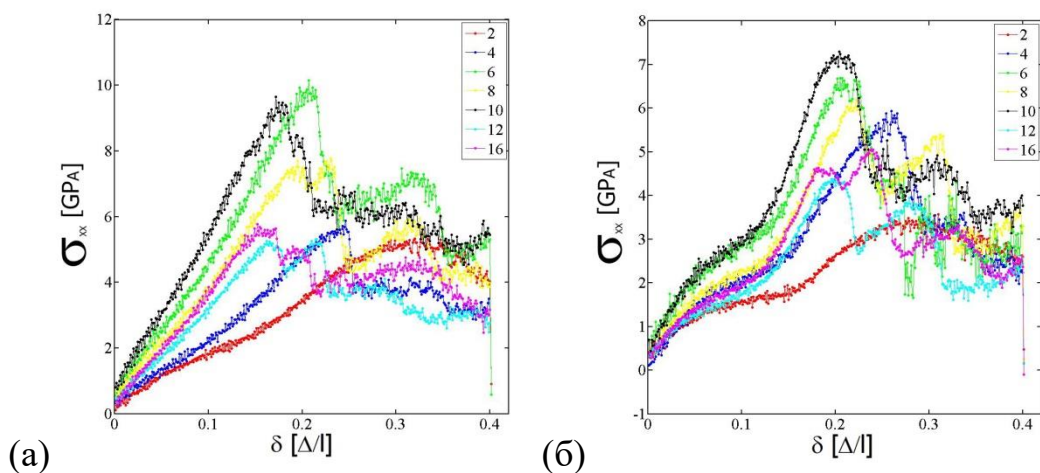


Рис. 11 Зависимость продольного напряжения от относительного растяжения для серебряной (б) и медной (а) пленок.

увеличением толщины пленки. Аналогичный характер изменений обнаружен и при исследовании медных пленок. Однако, в них не обнаружено области текучести, квантовый размерный эффект заключается в уширении области пластической деформации пленки для тонких пленок в сравнении с толстыми ($>1\text{нм}$). Кроме того, обнаружено изменение критических значений продольных относительных деформаций, при которых начинается разрушение поверхностных слоев пленки, в зависимости от толщины пленок.

Для оценки устойчивости пленки относительно продольных растяжений в работе была построена зависимость продольного напряжения при наложении и снятии нагрузки для серебряных и медных пленок толщиной 8 (тонкие пленки) и 16 (толстые пленки) атомных слоев, соответственно. Исследование обнаружило необычное свойство наноразмерных пленок – способность восстанавливаться после снятия продольной нагрузки растяжения и полного исчезновения дефектов в структуре тонких пленок, сформировавшихся в области пластичности и даже в области неупругих деформаций (Рис.12в,г). При этом более сильно данный эффект выражен у медных наноразмерных пленок. Как видно на Рис.12а,б гистерезис формируется только в области пластических деформаций и полностью исчезает в области упругости для медной пленки.

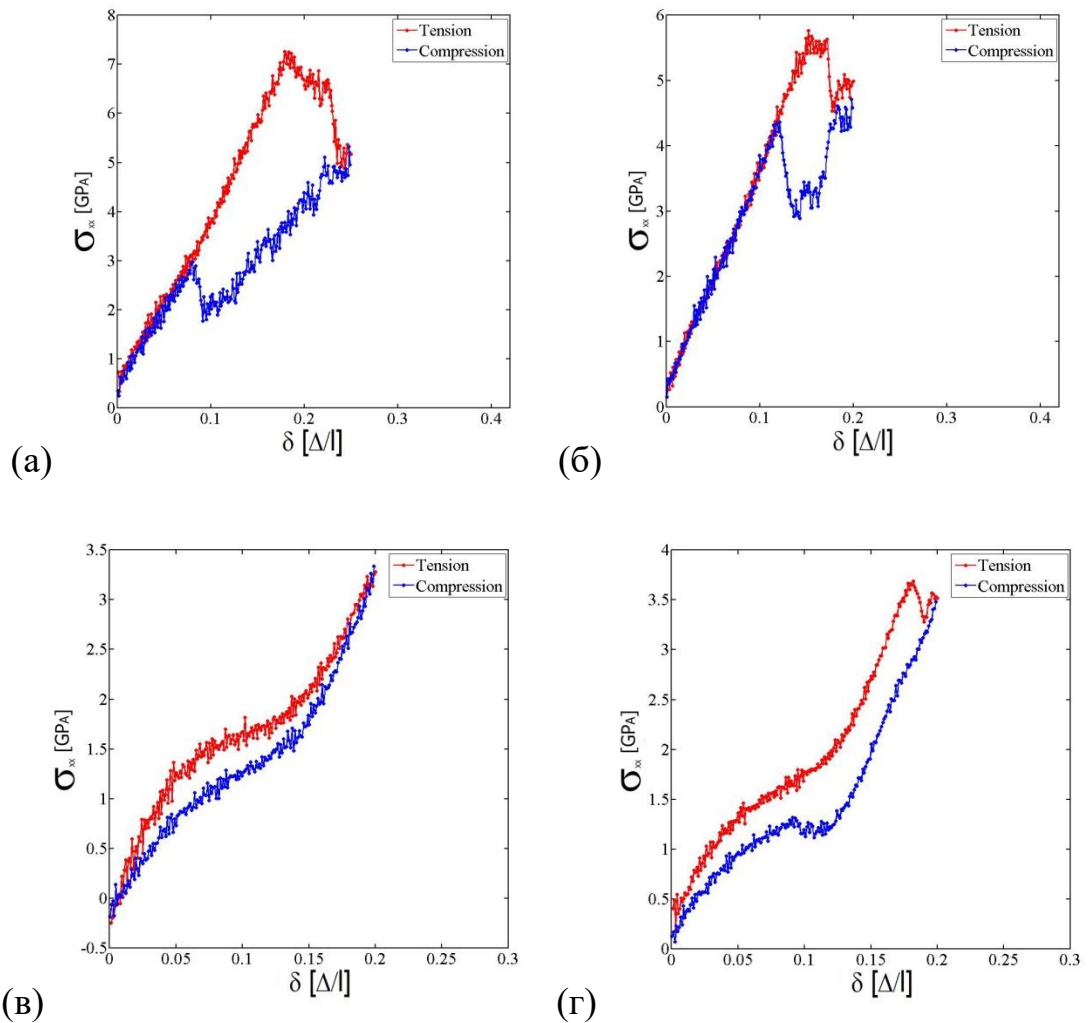


Рис. 12 Продольное напряжение медных пленок толщиной 8 (а) и 16 (б) атомных монослоев и серебряных пленок толщиной 8 (в) и 16 (г) атомных монослоев как функция относительной продольной деформации

3.3 Изучение механических и квантовых свойств одномерных нанопроводов на поверхности немагнитной медной нанопленки

И в заключительной части работы с помощью программного кода VASP были изучены атомные свойства Au-Mn проводов на медной подложке, которая показала наибольшую стабильность атомной структуры относительно продольного удлинения системы. Расчеты были проведены при низких температурах, были рассчитаны сила разрыва и критическое напряжение для данной системы. Смешанный Au-Mn нанопровод был смоделирован в виде 4-х атомной цепочки, расположенный на поверхности

Cu(110). Расчеты показали, что направления [110] является энергетически более выгодным для роста провода на поверхности меди.

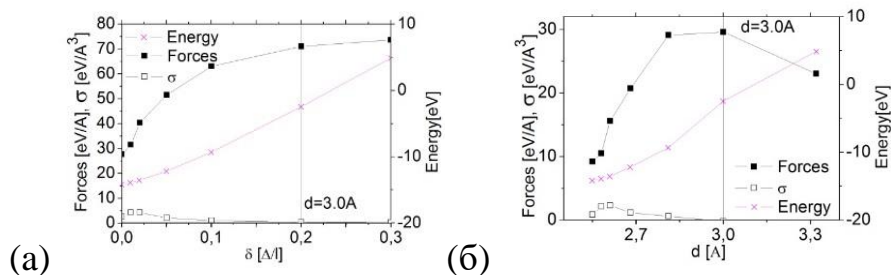


Рис. 13 Полная энергия, силы и напряжение Au-Mn провода на медной подложке Cu(110) как функция удлинения δ (а), как функция от межатомного расстояния в Au-Mn проводе (б).

Расчеты показали, что удлинение подложки в 22% является критическим для Au-Mn нанопровода. Происходит разрушение НП при межатомном расстоянии $\sim 3.0\text{Å}$. Разрушение поверхностного слоя медной подложки при комнатных температурах происходит при относительном удлинении медной подложки 27%. Этот расчет показывает, что межатомная длина разрыва зависит только от взаимодействий внутри цепочки.

Основные выводы

1. Исследован процесс формирования наноконтактов при использовании метода контролируемого разрыва, обнаружена зависимость процесса формирования контакта от компонентного состава. Показано, что для золотого контакта на последнем этапе перед разрывом формируются более длинные цепочки, чем для медной системы.
2. Изучен процесс продольного растяжения наноразмерных пленок, обнаружен размерный эффект в зависимости продольного напряжения от относительного удлинения пленки.

3. Обнаружена зависимость процесса удлинения пленок от компонентного состава пленки. В серебряных пленках обнаружена область текучести.
4. Рассчитаны критические значения сил и напряжений в одномерных структурах и в тонких пленках, приводящие к разрыву систем.
5. Обнаружен эффект восстановления атомной структуры металлических нанопленок из меди и серебра толщиной < 1 нм после снятия нагрузки.
6. Исследовано влияние продольного растяжения медной пленки на поверхностный Au-Mn нанопровод. Показано, что для медной пленки разрыв провода наступает при относительной деформации пленки 22%, в то время как разрушение поверхностного слоя пленки начинается при ее относительном удлинении только 27%.

По результатам работы опубликована статья в журнале из списка цитирования WoS: Smelova E.M., Sitnikov I.I., Zelensky V.S., Tsysar K.M., Andreev V.G., Vdovin V.A., Saletsky A.M. Mechanical properties of bimetallic one-dimensional structures, в сборнике Proc. SPIE 10224, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016, том 10224, с. 1022406, (2016).

Список литературы.

1. J. K. Gimzewski, R. Möller, Transition from the tunneling regime to point contact studied using scanning tunneling microscopy, Phys. Rev. B, 36, (1987), p.1284-1287
2. R. Wiesendanger, Scanning probe microscopy and spectroscopy, Cambridge University Press, Cambridge (1994)
3. T. Matsuda, T. Kizuka, Palladium wires of single atom width as mechanically controlled switching devices, Jpn. J. Appl. Phys., 45, (2006), p.1337-1339
4. H. D. Chopra, S. Z. Hua, Ballistic magnetoresistance over 3000% in Ni nanocontacts at room temperature, Phys. Rev. B, 66, 020403(R) (2002), p.1-3

5. J. Bettini, F. Sato, P. Z. Coura, S. O. Danatas, D. S. Galvao, D. Ugarte, Experimental realization of suspended atomic chains composed of different atomic species, *Nature Nanotechnology*, 1, (2006), p. 182-185
6. C. Zhou, C. J. Muller, M. R. Deshpande, J. W. Sleight, M. A. Reed, Microfabrication of a mechanically controllable break junction in silicon, *Appl. Phys. Lett.*, 67 (8), (1995), p.1160- 1162 130
7. H. Hegger, B. Huckestein, K. Hecker, M. Janssen, A. Freimuth, G. Reckziegel, R. Tuzinski, Fractal conductance fluctuations in gold nanowires, *Phys. Rev. Lett.*, 77, (1996), p. 3885-3888; Y. Kondo, K. Takayanagi, Gold nanobridge stabilized by surface structure, *Phys. Rev. Lett.*, 79, (1997), p. 3445-3458; T.W. Fishlock, A. Oral, R.G. Egdell, J.B. Pethica, Manipulation of atoms across a surface at room temperature, *Nature*, 404, (2000), p. 743-745
8. H. Ohnishi, Y. Kondo, K. Takayanagi, Quantized conductance through individual rows of suspended gold atoms, *Nature*, 395, (1998), p.780-783
9. V. Rodrigues, D. Ugarte, Real-time imaging of atomistic process in one-atom-thick metal junctions, *Phys. Rev. B*, 63, 073405 (2001), p.1-4
10. S.P. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas, *Science* 2008, 320, 5873, 190-194
11. M. Liu, Y. Han, L. Tang, J.-F. Jia et al., *Physical Review B* 86(12), 125427 (2012)
12. G. Rubio, N. Agrait, S. Vieira, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 2302–2305; C. Untiedt, G. Rubio, S. Vieira, N. Agrait, *Phys. Rev. B* 56, 2154–2160 (1997)
13. Subramanian K. R. S. Sankaranarayanan et al., *Phys. Rev. B* 76, 134117 (2007)
14. G.E. Norman, V.V. Stegailov, *Method of classical molecular dynamics: contribution to the foundations of statistical physics*, 141700, p.4-8
15. E. Fermi. *Cl.Sci.Fis.Mat.Nat.Rend.*, 6:602, 1927.
16. Е.М. Смелова, А.Л. Клавсюк, К.М. Цысарь, А.М. Салецкий, Исследование механических и электронных свойств Ag-Au и Co-Au наноконтактов методом первопринципной молекулярной динамики, *Вестник Московского Университета Серия 3. Физика. Астрономия*, N 1, с. 88-91 (2013).
17. V.S. Stepanyuk, P. Bruno, A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, W. Hergert, A.M. Saletsky, Structure and electronic states in Cu nanocontacts, *Surface Science*, 566-568, 944-948 (2004)
18. Smelova E.M., Tsysar K.M., Saletsky A.M., “Emergence of spin-filter states in Pt-Fe nanowires”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16, 8360-8366, (2014), V.S. Stepanyuk, P. Bruno, A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, W. Hergert, A.M. Saletsky, Structure and electronic states in Cu nanocontacts, *Surface Science*, 566-568, 944-948 (2004)

19. R. H. M. Smit, C. Untiedt, A. I. Yanson, and J. M. van Ruitenbeek, *Phys. Rev. Lett.* 87, 266102 _2001_, V. Rodrigues, J. Bettini, P. C. Silva, and D. Ugarte, *Phys. Rev. Lett.* 91, 096801 2003
20. I.I. Sitnikov, K.M. Tsysar, E.M. Smelova, A.M. Saletsky, Unusual magnetic properties of Au–Mn nanowires on copper and silicon substrates , *Physica Status Solidi B* 254, 1600850 (2017)
21. Е. М. Смелова, К. М. Цысарь, Д. И. Бажанов, А. М. Салецкий, «Атомная и электронная структуры смешанных проводов Au и Co. Исследование методом первопринципной молекулярной динамики.» , *Письма в ЖЭТФ*, том 93, вып. 3, с. 139-142 (2011)