

*На правах рукописи*

**Смирнов Алексей Сергеевич**

**НАНОСТРУКТУРЫ, СТАБИЛИЗИРОВАННЫЕ ПОВЕРХНОСТНЫМИ  
СОСТОЯНИЯМИ, И ИХ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА:  
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Специальности: 01.04.07 – физика конденсированного состояния  
01.04.11 – физика магнитных явлений

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико–математических наук

Москва – 2009

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова и на физическом факультете Университета Мартина Лютера (г. Халле, Германия).

**Научные руководители:** доктор физико–математических наук,  
профессор Салецкий Александр Михайлович

доктор физико–математических наук,  
профессор Степанюк Валерий Станиславович

**Официальные оппоненты:** доктор физико–математических наук,  
профессор Бушуев Владимир Алексеевич

доктор химических наук, профессор  
Багатурьянц Александр Александрович

**Ведущая организация:** Оренбургский государственный университет

Защита состоится «18» ноября 2009 г. в 16 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.002.01 при московском государственном университете имени М. В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр.2, МГУ, физический факультет, аудитория ЮФА.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Автореферат разослан «16» октября 2009 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 501.002.01  
кандидат физико–математических наук

Т. В. Лаптинская

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы.

Традиционные методы создания интегральных микросхем и модулей хранения информации в ближайшем будущем достигнут своих производственных пределов. Решение этой проблемы может быть достигнуто за счёт применения новых технологий в процессе создания элементов электронных приборов. В 1970 г. нобелевский лауреат Р. Фейнман предложил принципиально новый подход к созданию электронных компонентов, который получил название «снизу-вверх». Целью новой стратегии стало получение элементов, состоящих из наноструктур. В связи с тем, что при переходе к процессам, происходящим в наномасштабах, проявляются новые физические явления, возник необычайный научный интерес к методам создания новых атомных структур на поверхностях металлов, а также к их характеристикам. Кроме того, манипулирование отдельными атомами при помощи сканирующего туннельного микроскопа – процесс, не воспроизводимый в промышленных масштабах, поэтому актуальным становится исследование процессов самоорганизации атомов в наноструктуры, получение их структурных и магнитных характеристик, а также изучение размерных закономерностей.

Цель и задачи работы. Основной целью данной работы является теоретическое исследование процесса формирования наноструктур, образованных металлическими атомами на кластерах поверхности металлов типа (111) и вблизи них и изучение магнитных свойств низкоразмерных наноструктур, стабилизированных поверхностными состояниями. В частности были поставлены следующие задачи:

1. Изучение влияния эффекта квантового конфайнмента, создаваемого кластером меди, на диффузию атомов меди и на их самоорганизацию.
2. Исследование магнитных характеристик одномерных цепочек атомов и двумерных гексагональных массивов.
3. Изучение высокотемпературного ферромагнетизма, возникающего в системе нанокластеров железа на поверхности меди (111).

4. Разработка программного комплекса для моделирования самоорганизации металлических атомов на поверхности типа (111) в присутствии нанокластеров и исследования магнитных свойств низкоразмерных наноструктур.

**Научная новизна.** В настоящей работе впервые:

1. На основе кинетического метода Монте-Карло разработан комплекс программ, позволяющий моделировать процесс самоорганизации металлических атомов на поверхности типа (111) при наличии на ней нанокластеров и исследовать магнитные свойства низко размерных наноструктур.
2. Показано, что квантовый конфайнмент, возникающий на поверхности кластеров, приводит к образованию «разрешенных» и «запрещенных» зон для диффузии атома, вследствие чего, атомы в процессе самоорганизации формируют температурно-стабильные концентрические орбиты на кластере и около него. Исследовано влияние размера кластера и концентрации атомов на размер, количество и стабильность этих орбит.
3. Установлено, что одномерные и двумерные магнитные структуры, стабилизированные свободными электронами поверхности, имеют ферромагнитные свойства. Определена температура Кюри для линейных цепочек и гексагонального массива атомов. Получены зависимости коэрцитивной силы от типов исследуемых систем и их размеров.
4. Количественно исследован высокотемпературный ферромагнетизм, наблюдающийся в системе нанокластеров атомов железа на поверхности меди (111). Показано, что высокая температура Кюри в таких системах обусловлена высокой энергией обменного взаимодействия кластеров на поверхности посредством свободных электронов подложки.

**Практическая ценность.** Представленные в работе результаты исследований самоорганизации атомов и магнитных свойств низкоразмерных

наноструктур могут быть использованы при создании новых наноструктур и поиске новых ферромагнитных температурно-стабильных тонких пленок.

**Положения, выносимые на защиту.**

1. В условиях квантового конфайнмента поверхностных электронов процесс самоорганизации атомов меди происходит за счет формирования температурно-стабильных концентрических орбит на кластере меди и около него.
2. Ферромагнетизм магнитных одномерных линейных атомных цепочек и двумерных гексагональных массивов атомов, стабилизированных поверхностными состояниями.
3. Высокотемпературный ферромагнетизм, возникающий в системе нанокластеров железа на поверхности меди типа (111) за счет сильного обменного взаимодействия на поверхности посредством свободных электронов поверхности.
4. Комплекс программ, базирующихся на кинетическом методе Монте-Карло, для моделирования самоорганизации атомов на поверхности типа (111) в присутствии нанокластеров и исследования магнитных свойств низкоразмерных наноструктур.

**Апробация работы.** Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

1. International Conference on Clusters at Surfaces (Rostock, Germany, 2008)
2. 3-я Всероссийская школа молодых ученых «Микро-, нанотехнологии и их применение» (Черноголовка, 2008)
3. Конференция «Математика. Компьютер. Образование» (Пушино, 2009)
4. Конференция молодых ученых «Ломоносов 2009» (Москва, 2009)
5. Spring Meeting of German Physical Society (Dresden, Germany, 2009)
6. 20<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (Berlin, Germany, 2009)

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 3 научных статьи и тезисы к 8 докладам на научных конференциях (всего 12 печатных работ).

**Личный вклад автора.** Все основные результаты работы получены лично диссертантом. Вклад диссертанта в работу является определяющим.

**Структура и содержание работы.** Диссертационная работа состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 122 страницах, включает 48 рисунков и 2 таблицы. Список цитируемой литературы содержит 105 библиографических ссылок. Каждую главу открывает вступительная часть, в которой представлены краткое содержание и основные задачи текущей главы. В заключительной части диссертации сформулированы основные результаты, полученные в ней, и выводы.

### **КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, указана ее научная новизна, практическая значимость, приведено краткое содержание работы по главам.

**Первая глава** содержит библиографический обзор по теме диссертации. В главе проанализированы результаты экспериментальных и теоретических работ, посвященных самоорганизации металлических атомов на поверхности металлов типа (111), магнитным свойствам наноструктур и теоретическим методам исследования формирования тонких пленок и их функциональных характеристик.

В завершающей части главы сформулированы основные задачи диссертационной работы; они заключаются в исследовании процессов формирования наноструктур, стабилизированных поверхностными состояниями, и получении их основных магнитных характеристик. Для решения этих задач разработан программный комплекс, основанный на кинетическом методе Монте-Карло, который позволяет: 1) моделировать процесс самоорганизации металлических атомов на подложках типа (111) в присутствии на ней нанокластеров; 2) моделировать динамику магнитных моментов атомов в структурах, стабилизированных свободными электронами поверхности, для получения магнитных характеристик.

**Во второй главе** описаны основные методы и алгоритмы, использованные в разработанном программном комплексе моделирования

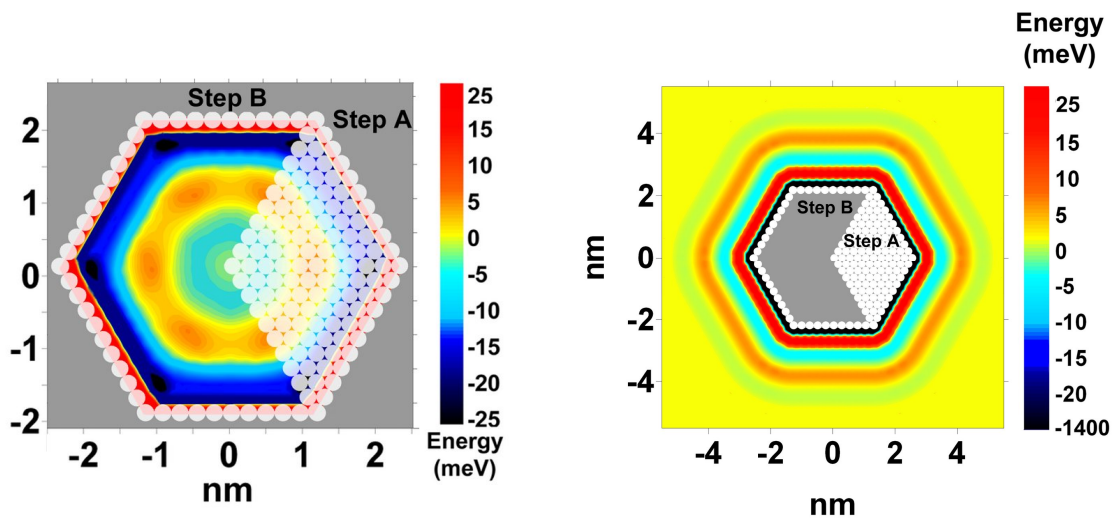
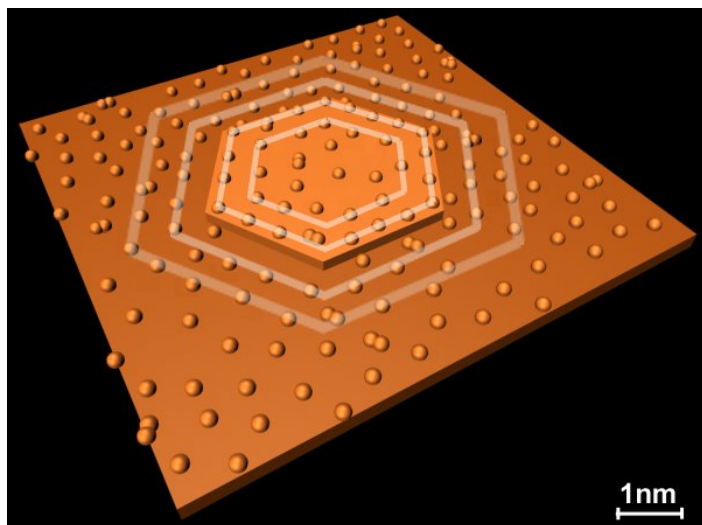


Рис. 1: Энергия взаимодействия атома меди с кластером меди а) атом находится на поверхности кластера; б) атом вблизи кластера. Границы кластера и одна треть его поверхности показаны полупрозрачными белыми кругами.

роста наноструктур и исследования их магнитных свойств. В первой части представлены основные положения общей теории процессов диффузии атомов на поверхности типа (111) и основные алгоритмы кинетического метода Монте-Карло [2] для моделирования самоорганизации атомов. Во второй части приведено описание кинетического метода Монте-Карло [2,3] при моделировании динамики магнитных моментов системы взаимодействующих магнитных единиц (атомов, нанокластеров или квантовых точек) для получения магнитных свойств наноструктур.

**Третья глава** посвящена исследованию самоорганизации атомов меди на поверхности меди (111) при наличии на ней кластеров.

Недавние эксперименты и теоретические работы показали, что кластеры, как и «корралы» или вакансионные дырки, имеют свойства квантовых резонаторов, т.е. на их поверхности возникает эффект квантового конфайнмента свободных электронов [4]. Вследствие данного явления, энергия взаимодействия атома с кластером зависит от взаимоположения атома относительно кластера. На рис. 1 изображены двумерные карты потенциала взаимодействия атома меди с кластером меди, когда атом находится на поверхности кластера (рис. 1а) и когда атом расположен вблизи кластера (рис. 1б). Расчет электронных взаимодействий производился при помощи метода ККР [5]. Как видно из рисунка, на кластере и около него располагаются чередующиеся зоны притягивающего и отталкивающего потенциала. Из-за эффекта Смолуховского близко к границе кластера на его



**Рис. 2:** Распределение атомов меди на кластере меди со стороной 4 нм и в его окрестности при плотности напыления  $\rho_0=5\%$  монослоя (ML).

поверхности отталкивающие барьеры имеют максимальное значение, а с внешней стороны, в непосредственной близости кластера, – потенциал притягивающий, что соответствует агломерации атома с кластером. Далее, по направлению от границы к центру кластера и к периферии, значение потенциала взаимодействия осциллирует с периодом, равным половине длины волны Ферми для поверхности меди (111). Значения чередующихся минимумов и максимумов затухают. Таким образом, вследствие неоднородных электронных взаимодействий атома с кластером справедливо предположить, что диффузия одиночного атома вблизи кластера и на его поверхности при низких температурах будет анизотропная. Также наличие разрешенных и запрещенных зон должно оказывать существенное влияние на самоорганизацию атомов на кластере и около него.

Чтобы показать это, в работе при помощи кинетического метода Монте-Карло промоделирована самоорганизация атомов меди на поверхности меди (111) при различных концентрациях напыления  $\rho_0$  и температуре  $T = 14$  К – минимальной температуре, при которой начинается свободная диффузия на чистой поверхности. В модели рассматривалось три типа взаимодействия: 1) атом – кластер (когда атом находится на поверхности кластера); 2) атом-кластер (в случае нахождения атома рядом с кластером); 3) дальнедействующее не прямое взаимодействие двух атомов [5].



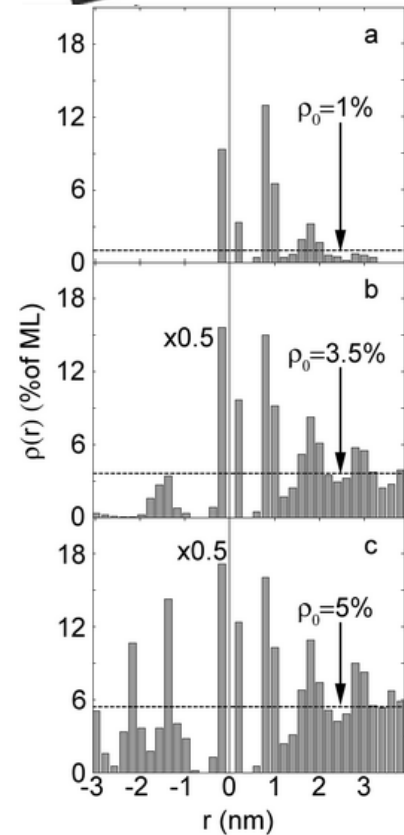
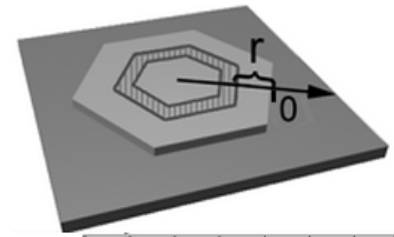
На рис. 2 показано мгновенное распределение атомов меди на поверхности кластера меди и около него при концентрации атомов 5% ML (монослоя). Из рисунка видно, что атомы на поверхности кластера и около него формируют замкнутые концентрические шестиугольные обреты (обозначены прозрачными шестиугольниками). Расстояние между атомами внутри одного кольца соответствует локальному минимуму в потенциале взаимодействия «атом-атом» для меди и равно 11 Å. Первая орбита на поверхности кластера расположена на расстоянии 3 Å от его границы, что соответствует области минимума в потенциале взаимодействия «атом – кластер» (рис. 1а). Первая орбита с внешней стороны кластера находится в 8 Å от его границы и соответствует первому минимуму в потенциале, изображенном на рис. 1б. Следует также отметить, что формирование вторых и третьих орбит на кластере и около него происходит, в основном, за счет непрямого дальнедействующего взаимодействия между атомами 1й орбиты с атомами, находящимися около нее, поскольку влияние кластера на атомную диффузию на этих расстояниях мало.

Для демонстрации влияния размерного эффекта на самоорганизацию атомов меди на кластере и вокруг него, в работе рассмотрены гистограммы статистически усредненной плотности атомов (количество атомов, приходящихся на площадь концентрического шестиугольного кольца) на кластере и вне него как функцию расстояния до границ кластеров. Положительные расстояния  $r$  соответствуют областям, расположенным вне кластера, в то время как отрицательные – областям внутри него. Как видно из рис.3, при концентрации  $\rho_0 = 1\%$  ML пик плотности атомов на кластере меньшего размера присутствует только у его границы, т.е. все атомы сосредоточены на расстояниях 1.5 Å от края типа А или 3 Å от края типа Б. При данном уровне напыления происходит формирование 1-ой орбиты атомов меди на кластере вдоль его границы. Первый пик плотности вне кластера соответствует атомам, присоединенным к кластеру в процессе напыления, в дальнейшем процессе самоорганизации они не подвижны. Следующий максимум плотности находится на расстоянии  $r \approx 9$  Å, что соответствует локальному минимуму в потенциале взаимодействия кластера

и атома, расположенного вне кластера (рис. 1б). Атомы, располагающиеся на расстоянии  $r \approx 9 \text{ \AA}$ , образуют первую внешнюю орбиту. Вторая орбита заселена атомами менее плотно и располагается на расстоянии  $r \approx 17 - 23 \text{ \AA}$  от края кластера. Влияние электронного взаимодействия с кластером на таких расстояниях мало; поэтому формирование второй орбиты происходит, в основном, за счет взаимодействия с атомами, расположенными на первой орбите. При увеличении  $\rho_0$  до 3.5 и до 5% ML наблюдается увеличение заселенности первой орбиты атомов наверху кластера ( $r \approx -2 \text{ \AA}$ ). Происходит также последовательное формирование 2-ой и 3-ей орбит ( $r \approx -12 \text{ \AA}$  и  $-22 \text{ \AA}$  соответственно). С внешней стороны кластера ситуация аналогичная: атомы преимущественно располагаются в разрешенных зонах ( $r \approx 18 \text{ \AA}$  и  $28 \text{ \AA}$ ), в то время как плотность атомов между ними мала. Расстояние между атомами, образующими одну орбиту, соответствует локальному минимуму в парном потенциале взаимодействия атомов меди и равно  $11 \text{ \AA}$ .

В результате исследований было количественно показано, что вследствие конфинмента поверхностных электронов энергия электронного взаимодействия кластера и атома, расположенного в его окрестности, существенно зависит от местоположения атома.

Как наверху кластера, так и в его окрестности возникают чередующиеся концентрические области с положительной и отрицательной энергией взаимодействия – разрешенные и запрещенные зоны. Существование таких



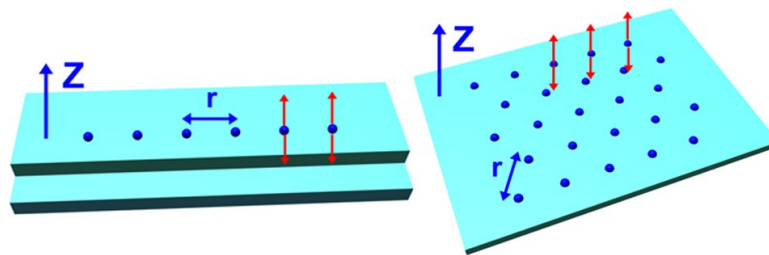
**Рис. 3:** Поверхностная плотность атомов  $\rho(r)$  на кластере и в его окрестности как функция расстояния до границ кластера  $r$  при различной начальной концентрации напыления  $\rho_0$ : а)  $\rho_0=1\%$ , б)  $\rho_0=3.5\%$ , в)  $\rho_0=5\%$  монослоя. На рис б) и в) пики, соответствующие расстоянию  $r = -0.2 \text{ нм}$  умножены на фактор 0.5.

зон приводит к сильной неравномерности диффузии атома в окрестности границ кластера и оказывает колоссальное влияние на процесс атомной самоорганизации. Полученные результаты свидетельствуют об определяющей роли квантового конфайнмента поверхностных электронов в процессах эпитаксиального роста.

**Четвертая глава** посвящена исследованию магнетизма низкоразмерных наноструктур. Как показали теоретические работы [5], энергия обменного взаимодействия  $J$  магнитных атомов, стабилизированных свободными электронами поверхности, может достигать 0,1 – 0,5 мэВ на расстояниях, соответствующих первому минимуму в потенциале непрямого дальнегодействующего взаимодействия на поверхности типа (111). В зависимости от расстояния связь между двумя атомами может быть ферромагнитной ( $J < 0$ ) или антиферромагнитной ( $J > 0$ ).

В данной главе проведены исследования ферромагнитных свойств наноструктур, состоящих из магнитных атомов, имеющих энергию обменного взаимодействия  $J = -0.3$  мэВ, энергию магнитной анизотропии  $K = 1.0$  мэВ и магнитный момент  $\mu = 3.2\mu_B$ . В качестве моделируемых образцов рассмотрены одномерная цепочка, состоящая из 10 и 100 атомов, и двумерный гексагональный массив из 12 и 100 атомов (рис. 4).

Результаты моделирования показали, что магнитный отклик одномерной цепочки атомов на внешнее осциллирующее магнитное поле содержит открытую петлю гистерезиса вплоть до температуры Кюри  $T = 2$  К (рис. 5а, черные точки), что говорит о ферромагнетизме в системе. При этом, если предположить, что обменное взаимодействие между атомами отсутствует



**Рис. 4:** Схематическое изображение рассматриваемых при моделировании систем: а) одномерная конечная цепочка атомов, расположенных на одинаковых расстояниях друг от друга; б) двумерный гексагональный массив атомов, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга.

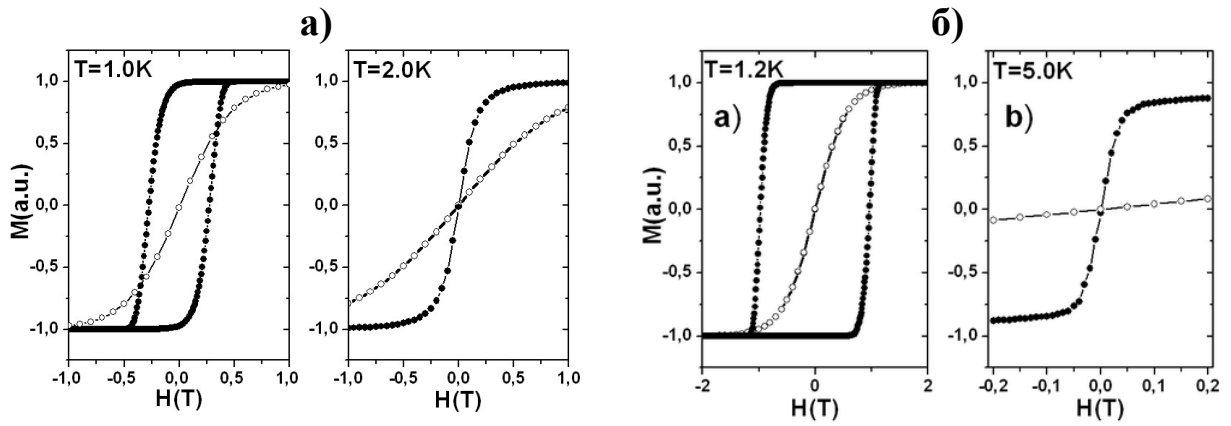


Рис. 5: Магнитный отклик одномерной цепочки при температурах 1.0К и 2.0К (а) и двумерного массива атомов при температурах 1.2К и 5.0К (б). Количество атомов в обеих структурах  $N=100$ .

( $J=0$ ), то сигнал при температурах меньше 2К – парамагнитный (рис.5, белые точки). На рис. 5б представлены результаты моделирования магнитного отклика двумерного гексагонального массива атомов во внешнем магнитном поле. Как видно, температура Кюри данной системы достигает 5К, при этом, в отсутствие обменного взаимодействия между атомами ( $J=0$ ) кривая (рис. 5б, белые точки) демонстрирует парамагнитное поведение системы.

Также в главе показано влияние размеров системы на значение коэрцитивной силы и температуру Кюри. На рис. 6 представлены зависимости коэрцитивной силы от температуры для двух систем, состоящих из разного количества атомов  $N$ : в случае одномерной линейной цепочки  $N=10$  (белые точки) и  $N=100$  (черные точки); для двумерного гексагонального массива –  $N=12$  (белые точки) и  $N=100$  (черные точки).

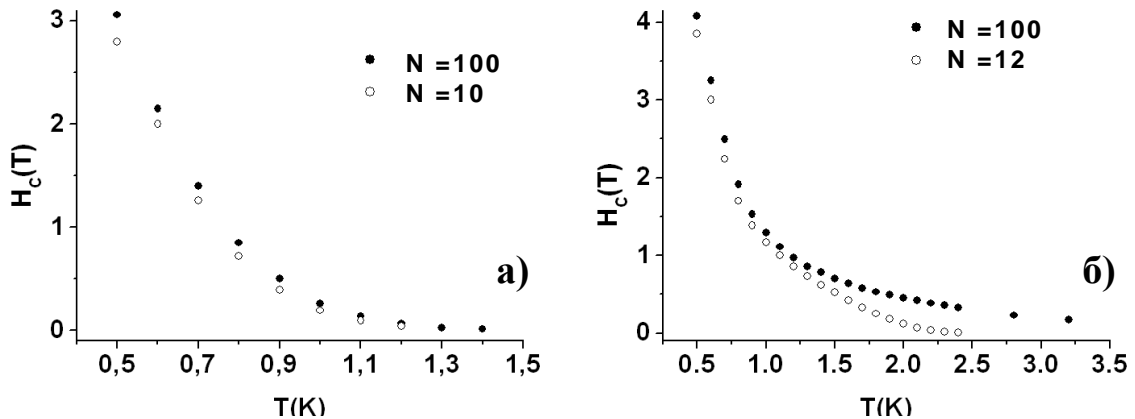


Рис. 6: Температурная зависимость коэрцитивной силы  $H_c$  для линейной цепочки атомов (а) и двумерной гексагональной структуры (б).

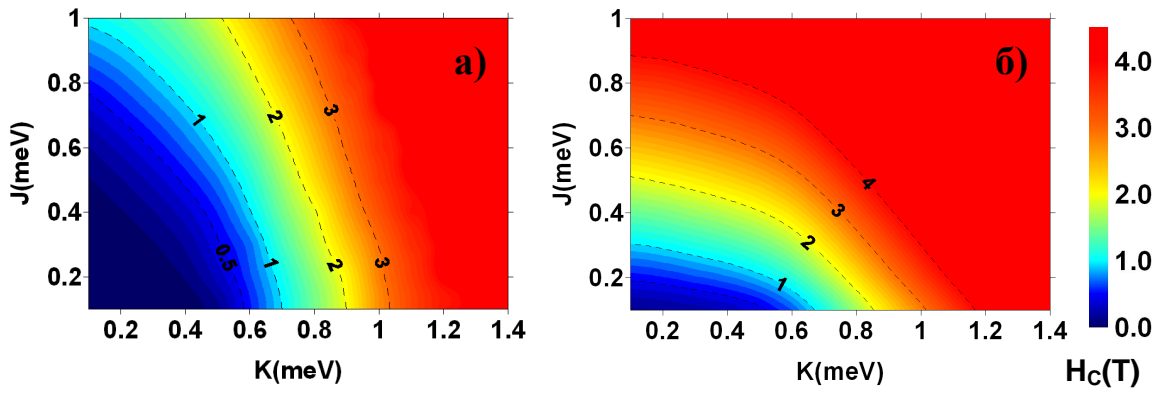


Рис. 7: Зависимость коэрцитивной силы  $H_c$  цепочки (а) и двумерного гексагонального массива атомов (б) от энергии магнитной анизотропии  $K$  и энергии обменного взаимодействия  $J$ . Диаграмма получена для температуры системы  $T=0.5\text{K}$  и количества атомов  $N=100$ . Пунктирные линии соответствуют эквипотенциальным линиям коэрцитивной силы соответствующего значения.

Температура Кюри одномерной цепочки из 100 атомов равна 1.4 К, а для цепочки 10 атомов – 1.2 К. При этом в двумерном гексагональном массиве из 12 и 100 атомов, температура Кюри равна соответственно 1.2 К и 5 К.

Поскольку в общем случае, энергия обменного взаимодействия атомов  $J$  зависит от расстояния между ними, а энергия магнитной анизотропии от сорта атомов и подложки, для полного представления о ферромагнетизме низкоразмерных систем, стабилизированных поверхностными состояниями, в работе предлагается исследовать зависимость коэрцитивной силы  $H_c$  от параметров  $J$  и  $K$  при фиксированной температуре. Для этого построена двумерная диаграмма зависимости  $H_c(J, K)$  – рис. 7. Рисунок демонстрирует возникновение ферромагнетизма в цепи и двумерном гексагональном массиве в полном диапазоне значений  $J$  и  $K$ , принятых в исследованиях. Возрастание  $J$  при фиксированном  $K$  ведет к увеличению  $H_c$ , также как и при фиксированном  $J$  наибольшее значение  $H_c$  достигаются при наибольших  $K$ . Было замечено, что мы не можем определить  $H_c$  для  $K > 1.5$  мэВ, т.к. нет ни одного переворота спина внутри полупериода осцилляции внешнего магнитного поля: спины остаются в исходном состоянии, т.е. система сохраняет постоянную начальную намагниченность.

**В пятой главе** количественно объясняется высокотемпературный ферромагнетизм, обнаруженный в экспериментах Д. Шена [6] по изучению магнетизма нанокластеров железа на поверхности меди (111). Эксперимент

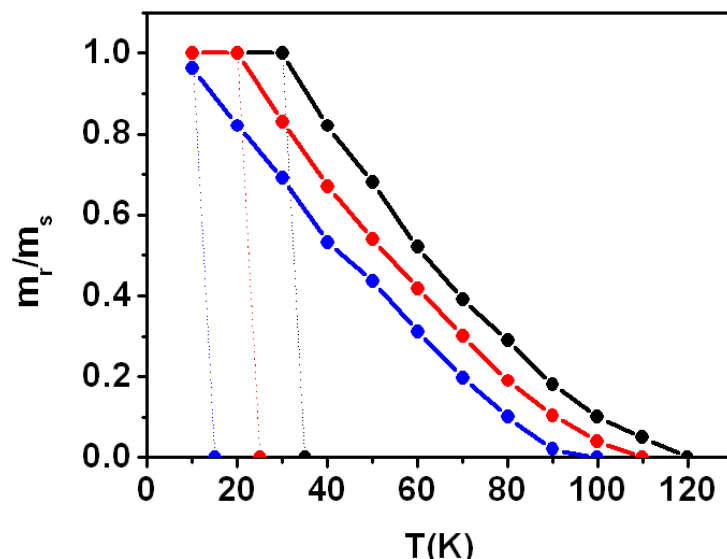


Рис. 8: Относительная остаточная намагниченность  $m_r/m_s$  как функция температуры. Синие точки соответствуют магнитной анизотропии  $K=30$  мэВ, красные –  $K=50$  мэВ, черные –  $K=70$  мэВ. Пунктирные кривые соответствуют этим же параметрам  $K$ , но в отсутствие обменного взаимодействия ( $J=0$  мэВ)

заклучался в следующем: авторы создали на поверхности меди (111) систему крупных магнитных частиц железа (нанокластеров), находящихся друг от друга на достаточно больших расстояниях (1-10 нм). Каждый нанокластер содержал в среднем 700 атомов. После чего они исследовали 2 вида магнитных откликов этой системы: спад намагниченности со временем и отклик на внешнее циклическое магнитное поле. Оказалось, что ферромагнитное поведение такой системы сохранялось вплоть до 200К. Чем же обусловлена такая высокая температура Кюри для ансамбля нанокластеров железа, объясняется в последней главе диссертации.

Взаимодействия, которые могут приводить к увеличению стабильности магнитной системы – это диполь-дипольное взаимодействие и не прямое взаимодействие, обусловленное наличием свободных электронов на подложке типа (111) [6]. Следовательно, можно предположить, что поскольку диполь-дипольное взаимодействие нанокластеров железа на расстояниях 1-10 нм пренебрежимо мало, то высокая температура Кюри возникает из-за сильного обменного взаимодействия между частицами посредством свободных электронов подложки.

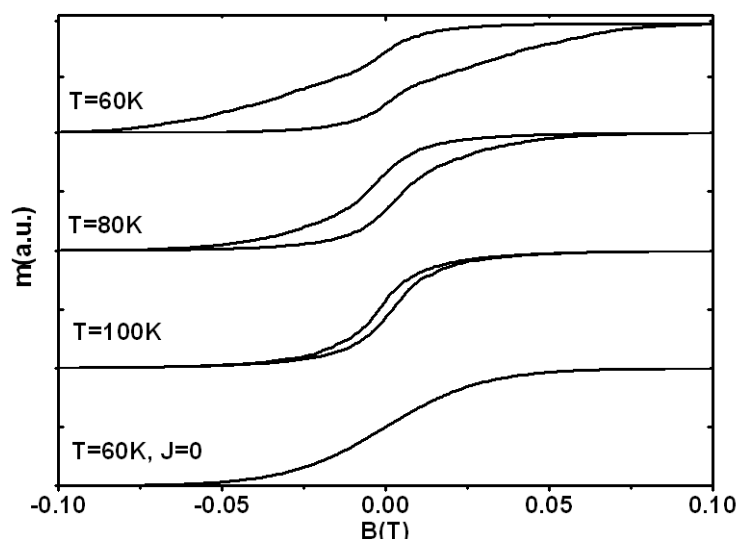
Недавно в работе [8] авторы теоретически показали, что кластеры железа, частично погруженные в подложку и находящиеся на расстоянии  $9 \text{ \AA}$

друг от друга, имеют энергию обменного взаимодействия  $J=-45$  мэВ. Такое большое значение энергии объясняется частичной погруженностью нанокластеров железа в поверхность меди (111). Ко всему прочему, визуальный анализ изображения 1 в работе [6] показал, что распределение частиц железа на поверхности не является случайным, а большинство нанокластеров располагается на одинаковом расстоянии друг от друга, предположительно равным 7–14 Å.

В настоящей работе на основе разработанной модели для получения магнитных свойств наноструктур получены магнитные характеристики системы нанокластеров железа на поверхности меди (111) в соответствии с данными экспериментов [6] и предположением, что обменная энергия взаимодействия нанокластеров  $J=-45$  мэВ. Общий магнитный момент железной частицы считался равным  $3000\mu_B$ , а энергия магнитной анизотропии  $K$  варьировалась от 30 до 70 мэВ. Такие большие значения энергии магнитной анизотропии, по нашим подсчетам, близки к реальности, поскольку характерное значение МАЕ атома железа на поверхности железного кластера равно 0.4 мэВ [7], при этом количество атомов в наночастице на поверхности равно 120 [6].

На рис. 8 показан результат моделирования кинетическим методом Монте-Карло остаточной намагниченности  $m_r$  ансамбля наночастиц как функции температуры для различных параметров магнитной анизотропии нанокластеров железа на поверхности меди (111). Каждая точка на графике является результатом усреднения по 100 независимым запускам для избежания возможных ошибок. Начальной конфигурацией является направление всех спинов нанокластеров вверх: намагниченность системы  $M=+1$ . Это соответствует тому моменту времени эксперимента [6], когда сильное внешнее магнитное поле намагничивает образец. В момент времени  $t = 0$  поле отключают, и снимается магнитный отклик системы в течение следующих 20 секунд. Значение намагниченности системы по истечению этого времени называется остаточной намагниченностью.

Синими точками на графике показана зависимость остаточной намагниченности от температуры для системы нанокластеров с энергией



**Рис. 9** Магнитный отклик системы нанокластеров при температурах 60, 80 и 100К. Параметры гамильтониана:  $K=50$  мэВ,  $J=-50$  мэВ. Нижняя s-образная кривая соответствует отсутствию обменного взаимодействия ( $J=0$ ) при 60К.

магнитной анизотропии  $K=30$  мэВ и энергией обменного взаимодействия  $J=-50$  мэВ. Температура Кюри для такой системы оказалось равной 100К. В тоже время, при отсутствии взаимодействия между кластерами ( $J=0$ ) температура Кюри не превышает 15К (синий пунктир на графике). Красными и черными точками обозначена зависимость от температуры системы, в которой магнитная анизотропия кластеров  $K = 50$  мэВ и  $K = 70$  мэВ соответственно. Несложно заметить, что температура, до которой наблюдается остаточная намагниченность, увеличилась до значений 110К и 120К соответственно. При отсутствии же обменного взаимодействия ( $J=0$ ) намагниченность системы исчезает уже при 25К и 35К.

Еще одним доказательством ферромагнитного поведения систем магнитных единиц является наличие открытой петли гистерезиса в магнитном отклике системы, помещенной во внешнее магнитное поле В.

На рис. 9 представлены магнитные отклики системы нанокластеров с параметрами  $K=50$  мэВ  $J=-50$  мэВ при температурах 60, 80 и 100К. При температуре 60К петля достаточно широкая и коэрцитивное поле  $B_c = 0.017$  Т. С повышением температуры до 80 К петля сужается до значения коэрцитивного поля 0.005 Т. При температуре 100К  $B_c=0.003$  Т. При повышении температуры гистерезис исчезает. Нижняя кривая соответствует



случаю, когда  $J=0$ , т.е. взаимодействие между кластерами отсутствует. Как видно, уже при 60 К при таких параметрах система парамагнитная.

Также в последней главе исследуются зависимости магнитных характеристик от концентрации частиц железа на поверхности меди (111) и среднего расстояния между соседними нанокластерами железа.

### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан программный комплекс, позволяющий моделировать процесс самоорганизации металлических атомов на поверхности типа (111) при наличии на ней нанокластеров и исследовать магнитные свойства низкоразмерных структур.
2. Исследовано влияние квантового конфайнмента, создаваемого кластером меди, на диффузию атомов меди по поверхности кластера и вблизи него. Доказано наличие запрещенных и разрешенных зон на кластере и около него, приводящее к возникновению атомных шестиугольных концентрических орбит. Установлена зависимость распределения атомов на кластере и около него от его размера и концентрации атомов на подложке.
3. Обнаружены ферромагнитные свойства для одно- и двумерных наноструктур, стабилизированных непрямым дальнедействующим взаимодействием через свободные электроны подложки типа (111).
4. Исследована зависимость коэрцитивной силы от размеров одно- и двумерных систем и энергий магнитной анизотропии  $K$  и обменного взаимодействия атомов  $J$ . Построена фазовая диаграмма коэрцитивной силы  $H_C$  в диапазоне параметров  $-1.0 < J < 0$  мэВ;  $0 < K < 1.5$  мэВ.
5. Показано, что при низких температурах наблюдается влияние квантового туннелирования на ферромагнетизм в цепочках атомов и их двумерных гексагональных массивах.
6. Доказано, что основным механизмом возникновения ферромагнетизма в низкоразмерных структурах является обменное взаимодействие магнитных атомов через свободный электронный газ.
7. В рамках разработанной модели определены температуры Кюри для системы нанокластеров с различными значениями их магнитной

анизотропии и концентрации. Описаны магнитные отклики системы, при помощи которых показано, что отсутствие обменного взаимодействия между кластерами приводит к уменьшению температуры Кюри в несколько раз.

8. Установлено, что наблюдаемый высокотемпературный ферромагнетизм в системе наночастиц железа (нанокластеров) на поверхности меди (111) обусловлен сильным обменным взаимодействием между нанокластерами, возникающим вследствие частичной погруженности нанокластеров в поверхность металла.

### СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. A.S. Smirnov, N.N. Negulyaev, L. Niebergall, W. Hergert, A.M. Saletsky and V.S. Stepanyuk, Effect of quantum confinement of surface electrons on an atomic motion on nanoislands: *Ab initio* calculations and kinetic Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. B* **78**, 041405 (2008).
2. A. S. Smirnov, N. N. Negulyaev, W. Hergert, A. M. Saletsky, V. S. Stepanyuk, Ferromagnetism in one- and two-dimensional nanostructures stabilized by surface-state electrons: kinetic Monte Carlo study. *New J. Phys* **11**, 063004 (2009).
3. P. A. Ignatiev, N. N. Negulyaev, A. S. Smirnov, L. Niebergall, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk, Magnetic ordering of nanoclusters ensembles promoted by electronic substrate-mediated interaction: ab initio and kinetic Monte Carlo studies. *Phys. Rev. B* **80**, 165408 (2009).
4. N.N. Negulyaev, A.S. Smirnov, L. Niebergall, W. Hergert and V.S. Stepanyuk. "Effect of quantum confinement of surface electrons on top of nanoislands on atomic diffusion". Rostock, Germany. International Conference on Clusters at Surfaces. 2008. p. 72.
5. А.С. Смирнов, А.М. Салецкий. "Исследование самоорганизации металлических атомов на поверхности металлов в присутствии нанокластеров". Черногловка. 3-я Всероссийская школа молодых ученых «Микро-, нанотехнологии и их применение». 2008. с. 16-17.

6. Смирнов А.С., Салецкий А.М. Применение метода кинетического Монте-Карло для изучения намагниченности ансамблей магнитных единиц с анизотропией (2009). Пушино. Конференция «Математика. Компьютер. Образование». 2008. с. 182.
7. Смирнов А.С. Рост наноструктур на поверхности металлов в условиях квантового конфайнмента: Cs на Ag(111). Москва. Конференция молодых ученых «Ломоносов 2009». 2009. Секция «Физика», подсекция «Твердотельная наноэлектроника», с. 24.
8. Pavel A. Ignatiev, Nikolay N. Negulyaev, Alexey S. Smirnov, Larissa Niebergall, Alexander M. Saletsky, and Valeri S. Stepanyuk. Ferromagnetism of magnetic nanodot ensembles promoted by substrate-mediated interaction. Dresden, Germany. Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society. 2009. O 12.3.
9. Larisa Niebergall, Alexey S. Smirnov, Nikolay N. Negulyaev, Wolfram Hergert, Alexander M. Saletsky, and Valeri S. Stepanyuk. Effect of confined surface electrons on atomic motion on nanoislands. Dresden, Germany. Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society. 2009. O 53.4.
10. P. A. Ignatiev, N. N. Negulyaev, A. S. Smirnov, L. Niebergall, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk. Magnetic ordering of nanoclusters ensembles promoted by indirect substrate-mediated interaction. Berlin. ICMFS. 2009. p.585.
11. N. N. Negulyaev, A. S. Smirnov, W. Hergert, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk. Kinetic monte carlo study of ferromagnetism in one- and twodimensional nanostructures stabilized by surface-state electrons. Berlin. ICMFS. 2009. p.539.

#### **ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА**

1. J.V. Barth, G. Constantini and K. Kern, Engineering atomic and molecular nanostructures at surfaces. *Nature* **437**, 671 (2005).
2. K. Fichtorn, W.H. Weinberg, Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations. *J. Chem. Phys.* **95**, 1090 (1991).
3. Y. Li and B.-G. Liu, Long-range ferromagnetism in one-dimensional monatomic spin chains. *Phys. Rev. B* **73**, 174418 (2006).

4. J. Li, W.-D. Schneider, R. Berndt and S. Crampin, Electron Confinement to Nanoscale Ag Islands on Ag(111). *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3332 (1998); J. Li, W.-D. Schneider, S. Crampin and R. Berndt, Tunnelling spectroscopy of surface state scattering and confinement. *Surf. Sci.* **422**, 95 (1999).
5. V.S. Stepanyuk, L. Niebergall, R.C. Longo, W. Hergert and P. Bruno, Magnetic nanostructures stabilized by surface-state electrons. *Phys. Rev. B* **70**, 075414 (2004).
6. J.P. Pierce, M.A. Torija, Z. Gai, Jurgen Shi, T.C. Schulthess, G.A. Farnan, J.F. Wendelken, E.W. Plummer and J. Shen, Ferromagnetic Stability in Fe Nanodot Assemblies on Cu(111) Induced by Indirect Coupling through the Substrate. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 237201 (2004); M.A. Torija, A.P. Li, X.C. Guan, E.W. Plummer and J. Shen, “Live” Surface Ferromagnetism in Fe Nanodots/Cu Multilayers on Cu(111). *Phys. Rev. Lett.* **95**, 257203 (2005).
7. M. Jamet, W. Wernsdorfer, C. Thirion, V. Dupuis, P. Melinon, A. Perez, D. Mailly, Magnetic anisotropy in single clusters. *Phys. Rev. B* **69**, 024401 (2004).
8. P. A. Ignatiev, N. N. Negulyaev, A. S. Smirnov, L. Niebergall, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk, Magnetic ordering of nanoclusters ensembles promoted by electronic substrate-mediated interaction: ab initio and kinetic Monte Carlo studies. *Phys. Rev. B* **80**, 165408 (2009).