

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

---

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра общей физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Моделирование роста атомных проводов серебра на поверхности платины

Выполнил студент  
405 группы  
Милютин Илья Денисович

---

Научный руководитель  
к.ф.-м.н., доцент Клавсюк А.Л.

---

Допущен к защите «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г.

Заведующий кафедрой общей физики  
д.ф.-м.н., профессор А.М. Салецкий

---

Москва  
2019 г.

# Содержание

Введение .....	3
1. Теоретическое и экспериментальное исследование формирования нанопроводов Ag/Pt(997) (обзор литературы) .....	4
2. Численный метод.....	7
2.1. Методы моделирования.....	7
2.2. Обоснование уместности применения метода КМК .....	8
2.3. Алгоритм .....	12
3. Результаты и обсуждение .....	15
3.1. Модель .....	15
3.2. Результаты моделирования.....	17
3.2.1 Система с подвижными димерами.....	20
3.2.2. Система с дефектами .....	21
3.3. Сравнение полученных результатов с теорией и экспериментом.....	22
Литература .....	27

# Введение

Поверхности с периодической ступенчатой структурой являются перспективным материалом для создания новых электронных устройств. При эпитаксиальном росте на подобных поверхностях могут формироваться одномерные упорядоченные структуры [1]. Поэтому подобные системы активно исследуются в последнее время. Исследование диффузии атомов при эпитаксиальном росте на ступенчатой поверхности, формирования атомных структур и их свойств является актуальной задачей [2-5].

Из-за увеличения энергии взаимодействия атомов примеси со ступенью, они могут скапливаться возле ступени и формировать атомные цепочки или провода вдоль ступени [6-8]. Одномерные структуры возле ступени формируют как металлы, так и молекулы [9,10]. Преимущество такого метода выращивания одномерных структур заключается в том, что, регулируя покрытие поверхности и среднее расстояние между ступенями можно контролировать длину цепочек и расстояние между ними. Привлекательность металлических проводов обусловлена их особыми электронными и магнитными свойствами [12], которыми можно управлять меня длину атомных цепочек.

Настоящая работа посвящена изучению процесса формирования атомных проводов Ag/Pt(997). Приоритетной задачей дипломной работы является определение факторов, влияющих на распределение длин атомных проводов.

# Глава 1

## Теоретическое и экспериментальное исследование формирования нанопроводов Ag/Pt(997) (обзор литературы)

В работе [10] было показано, что, используя вицинальную поверхность платины Pt с ширинами террас, распределенными в узком диапазоне, и регулируя температуру образца, чтобы контролировать энергию активации диффузии, можно ряд за рядом параллельно выращивать множество однородных 1D металлических атомных проводов с высокой плотностью (до  $5 \times 10^6 \text{ см}^{-2}$ ). Параметры экспериментального образца представлены на рисунке 1.1. Выбор подложки Pt(997) обусловлен удобством производства.

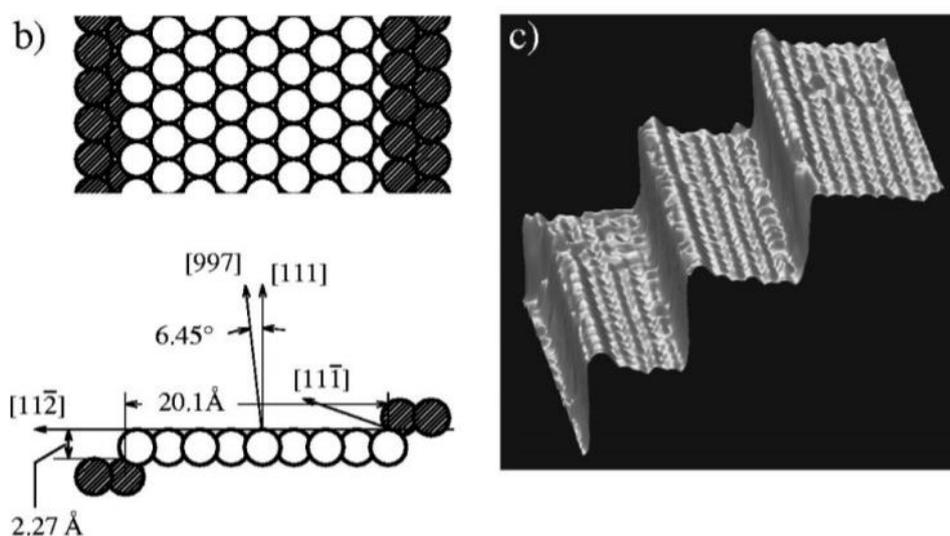


Рис 1.1. (a) СТМ изображение чистой поверхности Pt(997), средняя ширина террасы  $20.1 \pm 2.9 \text{ \AA}$ , ступени уходят вниз справа налево; (b) схематическое изображение террасы Pt(997), ниже приведены характерные параметры такой террасы; (c) вид сбоку на ступенчатую поверхность [10].

Напыление атомов производилось при температуре 400К, затем систему охлаждали до 77К и снимали изображения с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ).

Непрерывные моноатомные провода были получены для показателя покрытия адатомами поверхности  $\theta_w = 1/t$ , где  $t$  - средняя ширина террасы (измеряемая в атомах), и  $\theta$ , измеряемой в монослоях (МС). Методами СТМ было показано, что формирование непрерывных одноатомных цепей происходило благодаря объединению увеличивающихся в размерах одномерных цепочек, которые растут около ступеней вследствие диффузии адатомов. В основном длина таких цепей зависит от степени покрытия, температуры подложки, энергии связи адатома со ступенью и энергии на краях цепи.

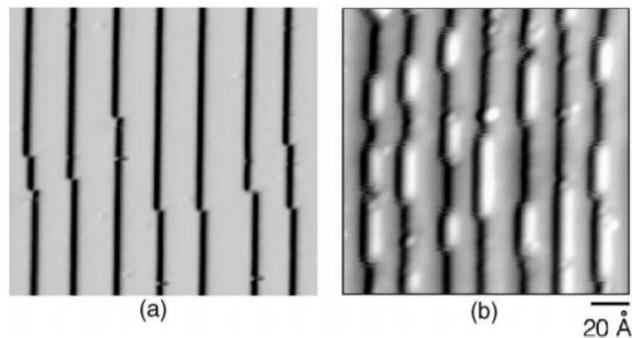


Рис. 1.2. Участок поверхности до (а) и после (б) напыления 0.04 монослоев Ag на Pt(997) при 400К. Светлые полосы на изображении (б) представляют цепочки [1].

В работе [1] представлено теоретическое распределение размеров одномерных атомных цепей в состоянии равновесия. Оно получено аналитически, исходя из простых термодинамических предположений. Будем искать статистическое распределение адатомов около идеальной грани ступени, не имеющей дефектов. Считаем, что одномерная решётка всего имеет  $N$  мест, количество адсорбированных атомов равно  $M$ , а общее количество атомных цепочек равно  $K$ . Для такой системы распределение  $n_i$  цепей, содержащих  $i$  атомов, задается выражением

$$n_i = K^2(M - K)^{i-1}M^{-i}.$$

Распределение  $f_j$  свободных мест между цепями задается как

$$f_j = K^2(N - M - K)^{j-1}(N - M)^{-j}.$$

Данные распределения являются функциями только лишь концентрации цепей  $K/N$  и адатомов  $M/N$ . Таким образом, равновесные распределения 1D атомных цепей и промежутков между ними зависят только от степени покрытия атомами подложки  $M/N$  и числа самих цепей  $K$ .

Теоретические распределения  $n_i$  и  $f_j$  можно сравнить с экспериментальными распределениями, найденными по изображениям (Рис.1.2), сделанным с помощью СТМ. На изображениях представлены одномерные провода серебра на поверхности платины Pt(997), образовавшиеся ряд за рядом на нижних краях ступеней на первоначальной стадии роста. Параметры напыления –  $\theta = 0.04$  МС атомов Ag ( $0.3\theta_w$ ) при температуре 400К, скорость напыления  $F = 0.003$  МС/с. Для получения экспериментальных распределений, представленных на Рис. 1.3, были использованы СТМ изображения и значения параметров  $N = 5816$ ,  $K = 211$ ,  $M = 1811$ . Теоретические распределения рассчитываются с такими же параметрами  $N, M, K$ .

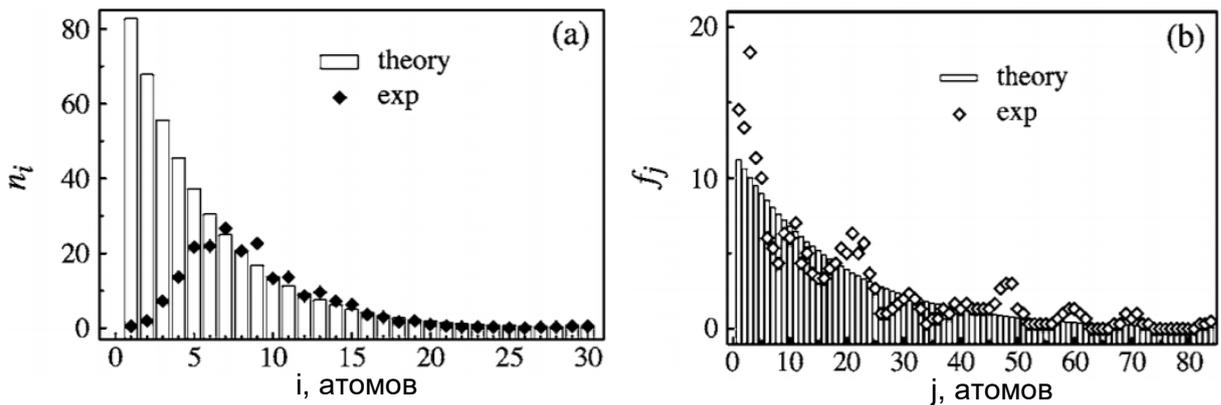


Рисунок 1.3. Рис. 2. (a) Теоретическое и экспериментальное распределения длин 1D атомных цепей. (b) Теоретическое и экспериментальное распределения промежутков между ними.

Для цепей, содержащих более 5 атомов, теоретическое распределение с высокой точностью описывает эксперимент. Расхождения в результатах для цепей меньшего размера могут быть обусловлены эффектами, выходящими за рамки исходных термодинамических предположений. Частью данной задачи является проверка этой теоретического распределения на модельных данных, а также попытка объяснить расхождение теории с экспериментом.

# Глава 2

## Численный метод

### 2.1. Методы моделирования

Для моделирования поверхностных явлений используется несколько методов. В порядке уменьшения точности модели их можно расположить следующим образом: теория функционала плотности (density functional theory, DFT) – методы молекулярной динамики (МД) – методы Монте-Карло (МК) [12].

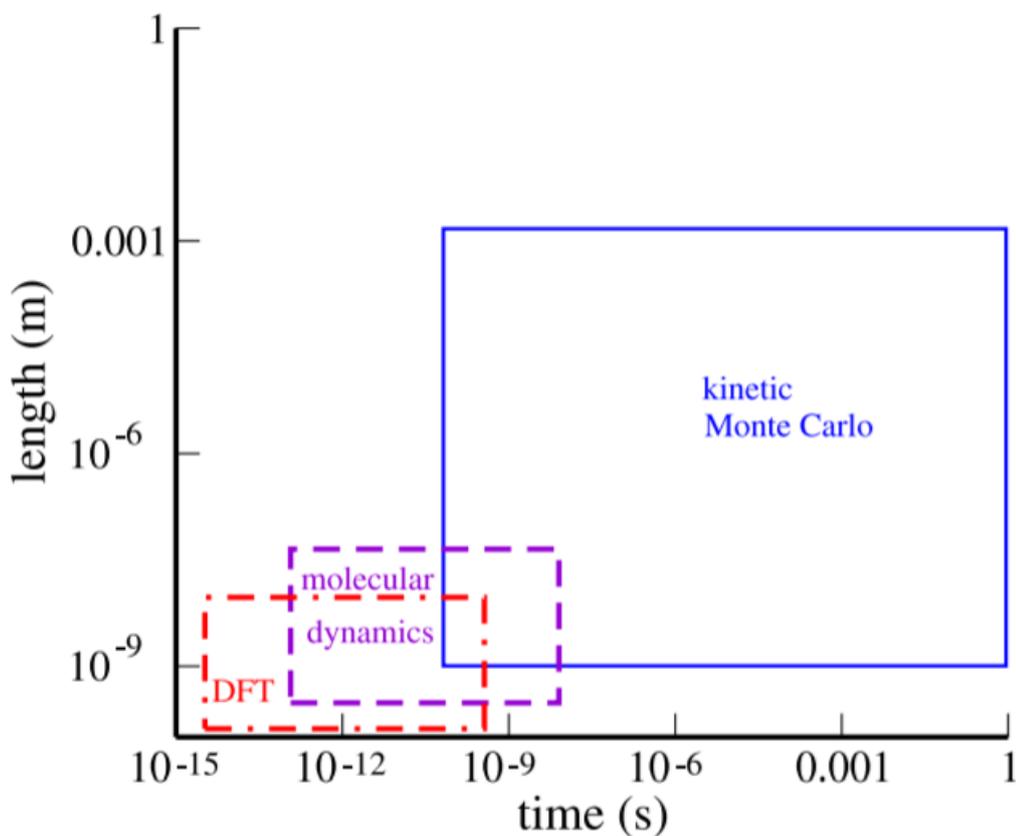


Рис 2.1. Характерные масштабы расстояний и времени, используемые в каждом методе [13]

Самые базовые и фундаментальные вычисления электронной структуры требуют использования временных и пространственных промежутков в масштабах осцилляций атома в составе кристаллической решетки, для которого характерное время осцилляции  $\tau \sim 10^{-13}$  с, а характерная амплитуда

$A \sim 10^{-11}$  м . На таком уровне часто применяют метод DFT, с помощью которого можно моделировать широкий класс химических явлений с высокой точностью.

Методы молекулярной динамики могут быть использованы или вместе с DFT, или на основе классической механики, что позволяет увеличить характерные масштабы и во времени, и в пространстве.

Первые два метода имеют более высокую точность, но во многих научных и технологических задачах необходимо проводить исследования на гораздо больших временных и пространственных промежутках. Задачи такого характера решаются с помощью статистической физики и методов Монте-Карло, которые позволяют исследовать сложные системы с большим количеством частиц.

## 2.2. Обоснование уместности применения метода КМК

Большой интерес представляет исследование динамической эволюции системы из одного состояния в другое. Для этих целей разработан алгоритм, получивший название кинетический метод Монте-Карло (КМК). Метод находит применение в физических системах, связанных с изучением радиационного отжига [15], явлений поверхностной диффузии [16], эпитаксиального роста кристаллов, а также в статистической физике и многих других областях [17].

В данной работе рассматривается моделирование динамической эволюции системы атомов. В этом классе симуляций основным инструментом является метод молекулярной динамики, который основан на использовании классических уравнений движения частицы. МД требует задания начальных потенциалов межатомного взаимодействия и установления граничных условий. Если эти условия выполнены, в дальнейшем ввод дополнительных данных не требуется, а поведение системы во времени будет естественным образом описываться с помощью интегрирования классических уравнений

движения. При этом могут система будет правильно динамически эволюционировать во времени. Если верно заданы потенциалы, а квантово-механическими эффектами можно пренебречь, то модель будет представлять реальную физическую систему с большой степенью точности. Стоит отметить, что серьезным ограничением метода является необходимость использования коротких временных промежутков ( $\sim 10^{-15}$  с), чтобы задействовать факт атомных осцилляций. Следовательно, общее время симуляции в большинстве случаев не превосходит  $\sim 10^{-6}$  с, в то время как процессы, которые мы хотим изучать происходят на значительно больших временных промежутках ( $\sim 10^{-3}$  с и более).

Кинетический метод Монте-Карло преодолевает ограничение по времени, используя факт, что долгосрочная динамика рассматриваемых физических систем состоит из диффузионных прыжков из одного состояния в другое.

В исследуемой системе рассматриваются события с относительно долгим периодом неактивности между прыжками. Для простоты будем считать, что каждому состоянию системы ставится в соответствие энергетическая яма, а долгое время ожидания между переходами возникает из-за того, что системе необходимо преодолеть энергетический барьер другого состояния. Схематично такая модель представлена на рисунке 2.2.

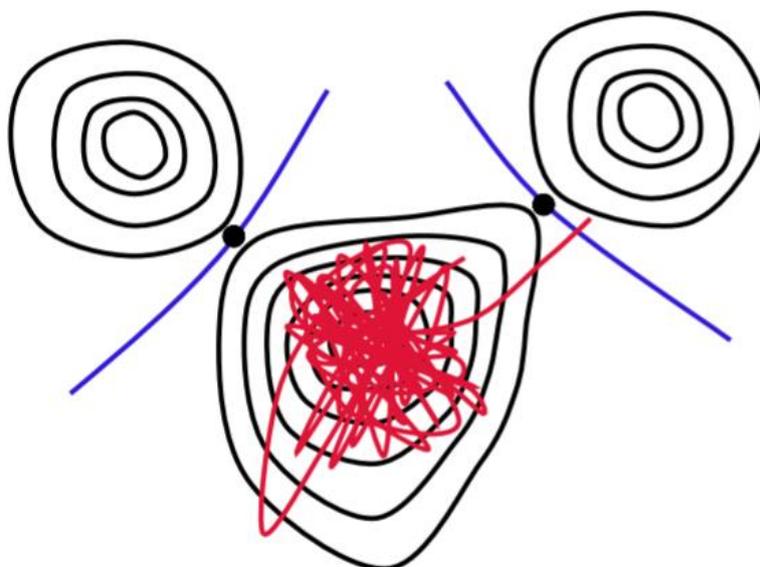


Рис. 2.2. Изолинии поверхности потенциальной энергии для редких по времени событий, ограниченных барьерами. Траектория (красная линия) после многих вибраций находит путь, по которому можно перейти в новое состояние. Черными точками обозначены седловые точки [12].

Вместо того, чтобы рассматривать траекторию движения атома через каждый период колебаний, переходы из одного состояния в другое делаются прыжком. Весь процесс эволюции системы рассматривается не как переходы отдельных атомов между различными позициями, а как переход всей системы между различными состояниями.

Следствием такого подхода к моделированию является достижение значительно больших, по сравнению с молекулярной динамикой, временных масштабов  $\sim 10$  с. В данной работе изучались поверхностные явления с характерным временем моделирования  $\sim 10^2 - 10^9$  с.

Основным свойством систем с редкими событиями является то, что из-за длительного времени ожидания между событиями, система забывает свое предыдущее состояние. Тогда каждому возможному прыжку в соседнюю энергетическую яму можно поставить в соответствие частоту перехода  $\nu_{ij}$ , которая описывает вероятность перехода из  $i$ -го состояния в  $j$ -е в единицу времени. Численное выражение константы перехода будет дано позже в этой главе, но пока можно сказать, что  $\nu_{ij}$  полностью определяется формой

поверхностей потенциальной энергии и температурой для данных  $i$ ,  $j$  состояний.

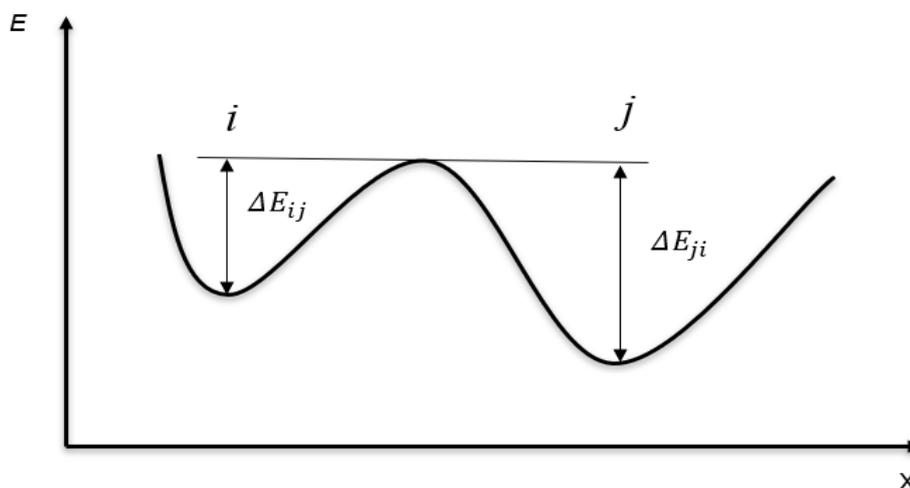


Рис. 2.3. Энергетические барьеры при переходе системы из  $i$ -го в  $j$ -е состояний и в другую сторону

Случайные процессы, эволюция которых после любого заданного значения временного параметра  $t$  не зависит от эволюции, предшествовавшей  $t$  по определению являются марковскими. Тогда динамика последовательных переходов системы из состояния в состояние соответствует случайным блужданиям. Поэтому, зная все частоты перехода, с помощью исполнения событий на основе случайных блужданий можно корректно переводить систему через состояния. При этом конечный результат каждого перехода не будет отличаться от результатов метода молекулярной динамики, но потребует значительно меньше вычислительных ресурсов, что позволит моделировать события на больших интервалах времени.

Зависимость константы скорости (частоты) перехода из  $i$ -го в соседнее  $j$ -е состояние от температуры  $T$  задается распределением Больцмана

$$v_{ij} = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_{ij}}{kT}\right),$$

где  $\nu_0$  – размерный фактор частоты, определяющийся экспериментально для данных атома и поверхности. В данной работе предполагается, что  $\nu_0$  не зависит ни от температуры, ни от события.

### 2.3. Алгоритм

В отличие от алгоритма Метрополиса [13], где за один шаг конфигурация системы может измениться или остаться прежней, в алгоритме КМК система за каждый шаг симуляции всегда переходит в новое близлежащее состояние. Рассмотрим теперь процедуру исполнения алгоритма.

После определения всех возможных событий для каждого из атомов исследуемой системы и задания корректных энергетических барьеров для них, можно посчитать суммарную частоту в системе

$$\nu_{tot} = \sum_i \nu_i n_i,$$

где  $i$  – номер класса возможного события;  $n_i$  – число возможных реализаций событий данного класса.

Чтобы выбрать событие, будем генерировать случайное число  $r_1$  из равномерного распределения на интервале (0,1). Будем считать, что выбрано определенное событие, если для числа  $k$ , соответствующего этому событию, выполняется соотношение

$$\sum_{i=0}^k \nu_i n_i \geq \nu_{tot} r_1 > \sum_{i=0}^{k-1} \nu_i n_i$$

Когда событие выбрано, необходимо выбрать конкретную реализацию данного события. Так как в пределах одного события все реализации равновероятны, то выбрать определенную реализацию можно с помощью еще одного случайного числа  $r_2$ . Тогда событие  $k$  будет реализовываться через  $int(n_i r_2)$ .

Процедура выбора событий представлена на рисунке 2.4. Частоты нормированы на единицу.

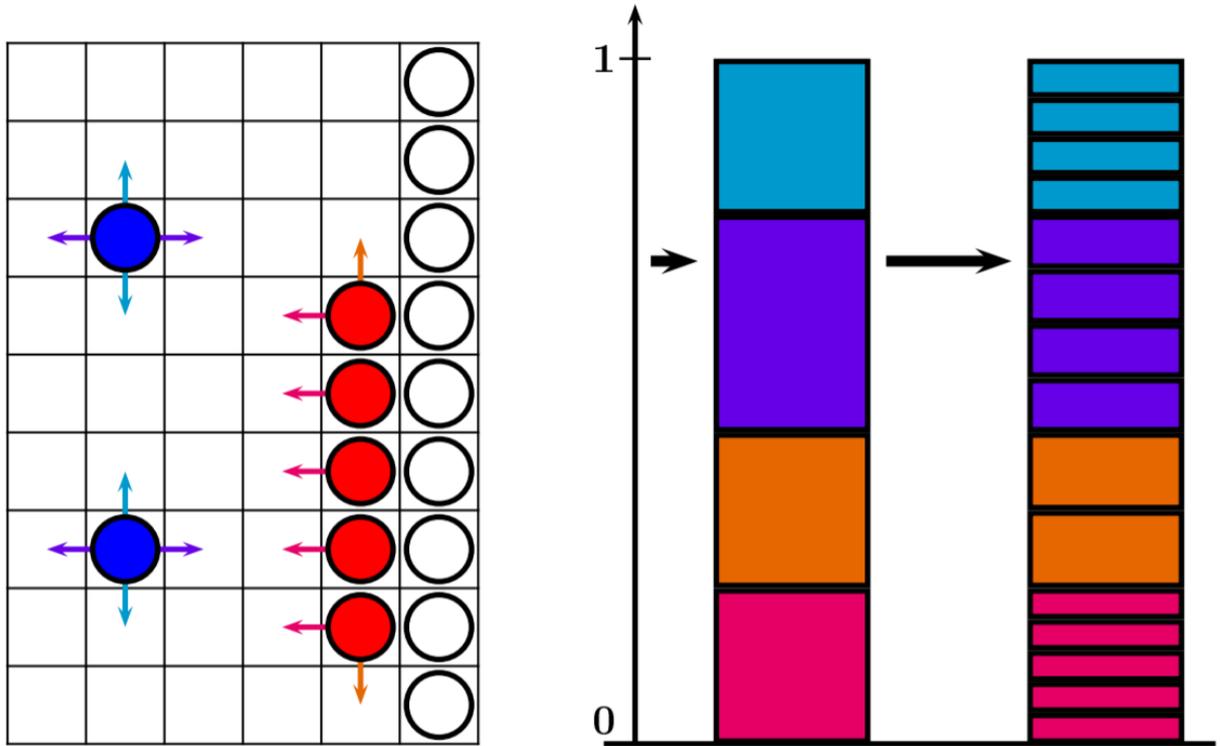


Рис. 2.4. Принцип выбора событий в алгоритме КМК. Стрелкам одного цвета соответствует одинаковые события (слева). В пределах события частоты переходов одинаковы. Все частоты для каждого класса суммируются (справа). Выбор конкретной реализации события происходит в два этапа: сначала выбирается событие, затем его реализация [13].

Рассчитанные с помощью распределения Больцмана частоты переходов имеют простой физический смысл: величина  $1/v_{tot}$  представляет среднее время ожидания до следующего события. Тогда среднее число событий, произошедших за промежуток времени  $\Delta t$  равно  $v_{tot}\Delta t$ . В соответствии с распределением Пуассона, вероятность того, что ни одно событие за время  $\Delta t$  не произойдет задается как

$$P(0) = \exp(-v_{tot}\Delta t).$$

Тогда вероятность, что произойдет одно или более событий за  $\Delta t$  будет

$$P = 1 - P(0) = 1 - \exp(-v_{tot}\Delta t).$$

Принимая во внимание, что случайная величина  $r_3$  равномерно распределена на интервале  $(0,1)$ , можно получить выражение для  $\Delta t$  – изменения времени за каждый шаг алгоритма КМК

$$\Delta t = -\ln r_3 / \nu_{tot}$$

Время Монте-Карло рекурсивно обновляется:  $t = t + \Delta t$ . Таким образом, на каждом шаге программы система динамически эволюционирует во времени из состояния в состояние. Критерий остановки программы определяется для конкретной задачи, но в большинстве практических задач работа алгоритма ограничивается либо количеством итераций, либо максимальным временем в моделированной системе.

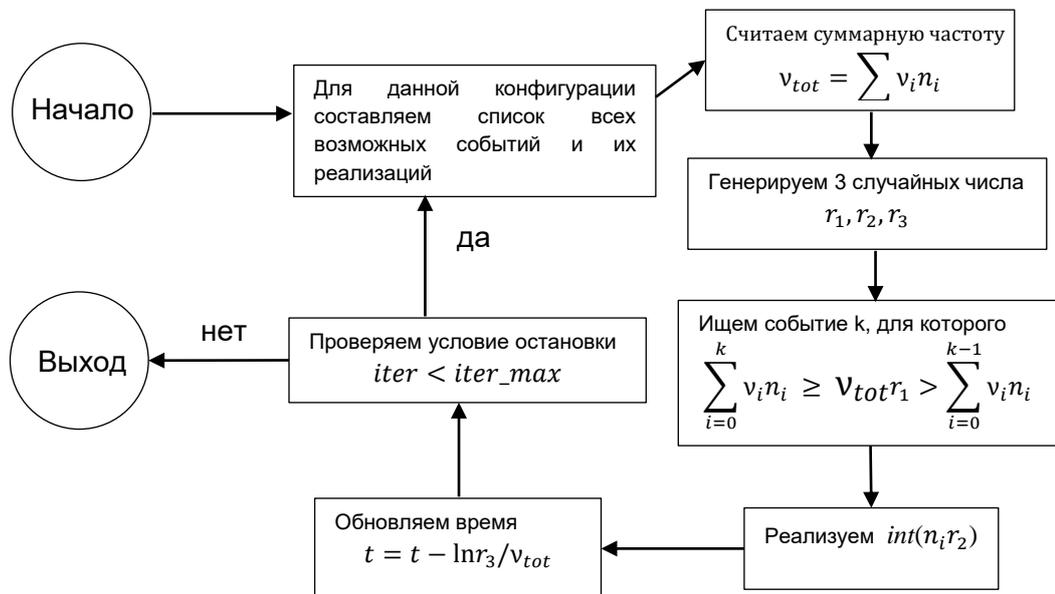


Рис. 2.5. Блок-схема кинетического метода Монте-Карло

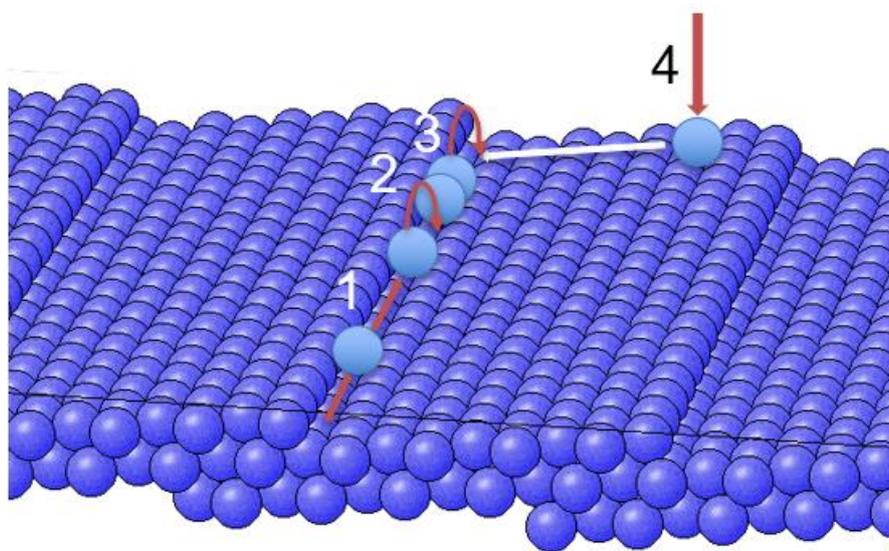
# Глава 3

## Результаты и обсуждение

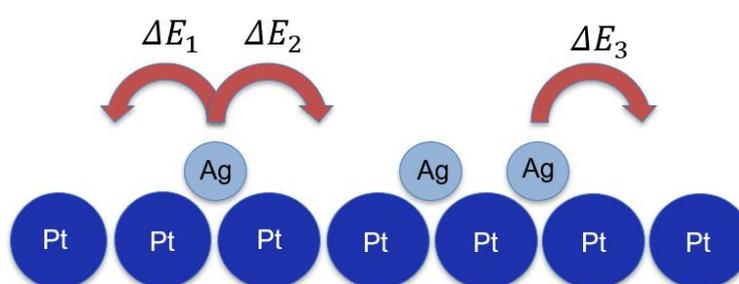
### 3.1. Модель

Для того чтобы можно было сравнить полученные результаты с экспериментом, изучение явления самоорганизации атомов серебра проводилось на системе, имитирующей ступенчатую поверхность Pt(997). В такой системе терраса рассматривается как поверхность с индексами Миллера (111). Принимая во внимание параметры эксперимента [10] и учитывая, что диффузионные барьеры для атомов Ag на террасе Pt(111) равны 0.17 eV [17], при температуре напыления  $T = 400\text{K}$  частоты переходов к краю террасы  $\nu \sim 10^9$ , что существенно больше частоты прыжков вдоль ступени  $\nu_{\text{ст}} \sim 10^3$  при максимальной рассматриваемой в данной задаче температуре  $T = 140\text{K}$ . Так как среднее время между переходом системы из одного состояния в другое обратно пропорционально частотам, то можно считать, что, в масштабе времени прыжка атома вдоль ступени, напыленный в любое место поверхности атом мгновенно переместится к ней.

Энергетические барьеры  $\Delta E$  были посчитаны с помощью программы Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) [18], в которой алгоритм самосогласованного решения уравнений Кона-Шема реализуется на основе плоских волн. В этих расчетах используется градиентная аппроксимация для обменно-корреляционного функционала энергии [19] и PAW потенциалов [20]. В модели рассматриваются 4 события – прыжок к цепи ( $\Delta E_1 = 0.235\text{ eV}$ ), свободный прыжок вдали от других атомов ( $\Delta E_2 = 0.241\text{ eV}$ ), отрыв крайнего атома от цепи ( $\Delta E_3 = 0.295\text{ eV}$ ) и напыление нового атома.



(a)



(б)

Рис. 3.1. (а) Возможные события на каждом шаге Монте-Карло. 1 – прыжки вдали от атомов (2 и более мест), 2 – прыжок к цепочке, 3 – отрыв атома от цепочки; (б) Соответствующие этим событиям энергетические барьеры

Параметры ячейки устанавливаются таким образом, чтобы сохранялось значение отношения числа напыленных атомов к числу мест около ступеней, которое для соответствия эксперименту определяется как  $\frac{M}{N} = 0.31$ ; для данной работы  $M = 362$ ,  $N = 1164$ . Из индексов Миллера определяется ширина террасы  $w = 9$  атомов. Скорость напыления задается значением потока  $F_{dep} = 0.004$  МС/с, тогда для указанных параметров ячейки частота напыления  $\nu_{dep} = 41.9$  Гц. Расстояние, на котором объекты в модели взаимодействуют друг с другом, составляет 2 атома, поэтому при данной

длине и ширине террасы частоты переходов для каждого класса событий не зависят от параметров размера, а определяются только температурой и высотой барьера.

Кроме этого, для одной температуры была исследована система с дефектами, представляющими из себя одиночные или парные неподвижные атомы, разбросанные случайным образом (на основе равномерного распределения) вдоль края ступени. Также была смоделирована система с подвижными димерами.

## 3.2. Результаты моделирования

Ниже приведены полученные гистограммы распределений длин атомных цепочек для систем с различными параметрами температур в интервале от 70 К до 140 К с шагом 5 К. Выбор температурного интервала был обусловлен несколькими причинами. Во-первых, необходимо было провести расчеты для диапазона температур около  $T \approx 75$  К и окрестностях, так как экспериментальное исследование проводилось не при одной фиксированной температуре, о чем будет сказано позже. Во-вторых, использование температур, меньших чем 70 К, приводит к увеличению внутреннего времени Монте-Карло до напыления всех атомов и достижения состояния квазиравновесия системы в  $\sim 10^2$  раз на каждые 5 К понижения температуры. Для 70 К такое модельное время достигает  $\sim 10^{10}$  с уже для  $5 \times 10^4$  шагов алгоритма и дальнейшее понижение температуры не согласуется реальными условиями. В-третьих, исследование систем с большими температурами экспоненциально увеличивает время выполнения программы, что в совокупности с необходимостью сбора достаточной статистики существенно усложняет задачу. Кроме того, как будет показано, дальнейшее повышение температур не требуется, так как система становится слишком неустойчивой.

Критерием остановки алгоритма является ограничение количества итераций  $i$  сверху на уровне  $i_{max}$ , при этом  $i_{max}$  привязан к итерации

напыления последнего атома. Для каждой из температур этот параметр определяется индивидуально так, чтобы формировалось устойчивое распределение, а количество итераций при этом было оптимально с точки зрения использования вычислительных мощностей.

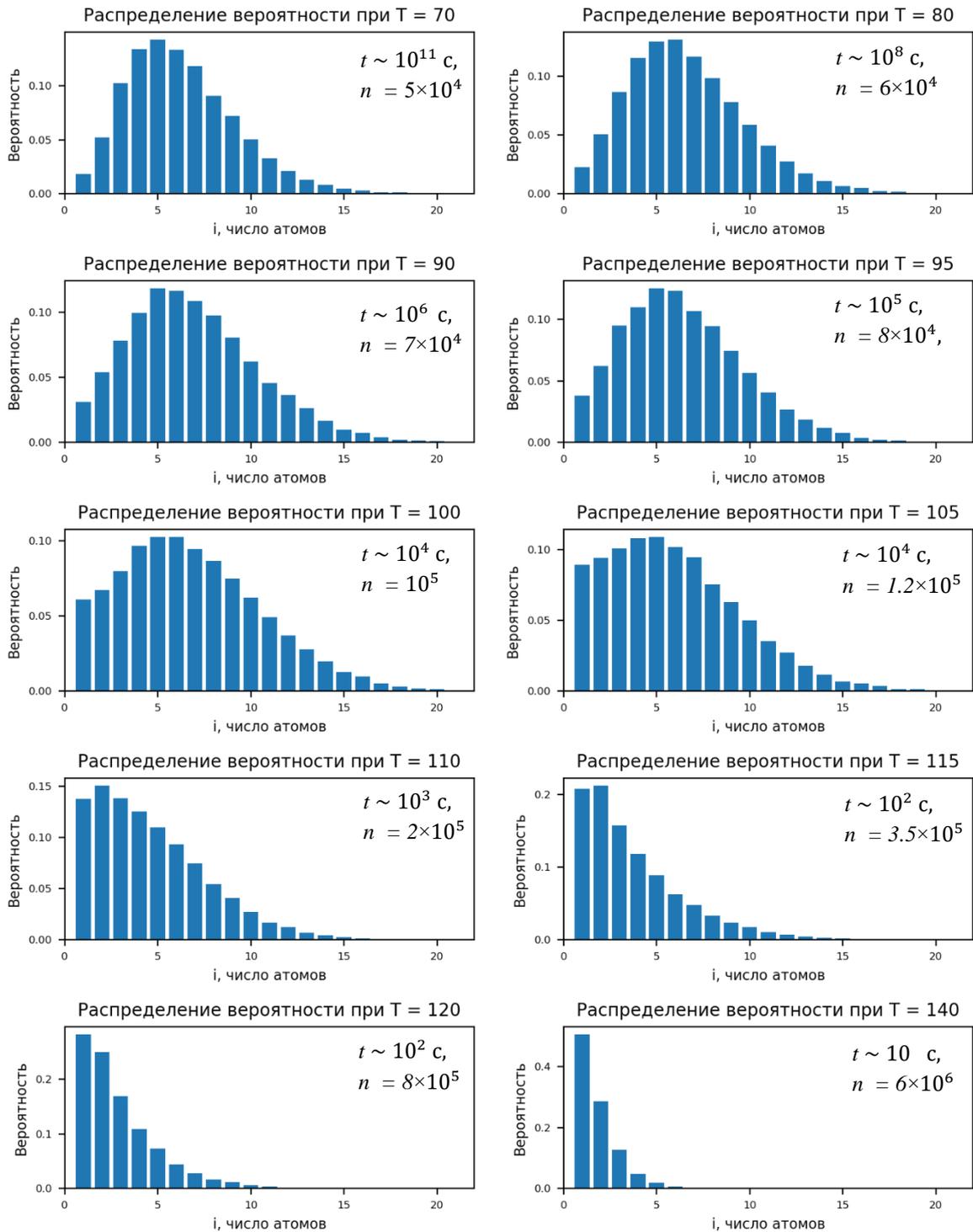


Рис. 3.2. Распределения длин атомных цепей смоделированной системы Ag/Pt(997) в зависимости от параметра  $T$ .  $t$  – время Монте-Карло,  $n$  – количество итераций

Анализ полученных распределений показывает, что при повышении температуры пик гистограмм смещается в область малых длин атомных цепочек, увеличивается количество одиночных атомов. При  $T_{кр} = 105\text{K}$  пик распределения слабо выражен; дальнейшее повышение температуры приводит к резкому уменьшению средней длины цепочки. Явление смещения пика распределения можно объяснить повышением частоты тепловых колебаний атома на месте, из-за чего преодоление потенциального барьера становится более вероятным. Кроме того, можно заметить, что вероятность обнаружить одиночный атом нелинейно повышается с ростом температуры.

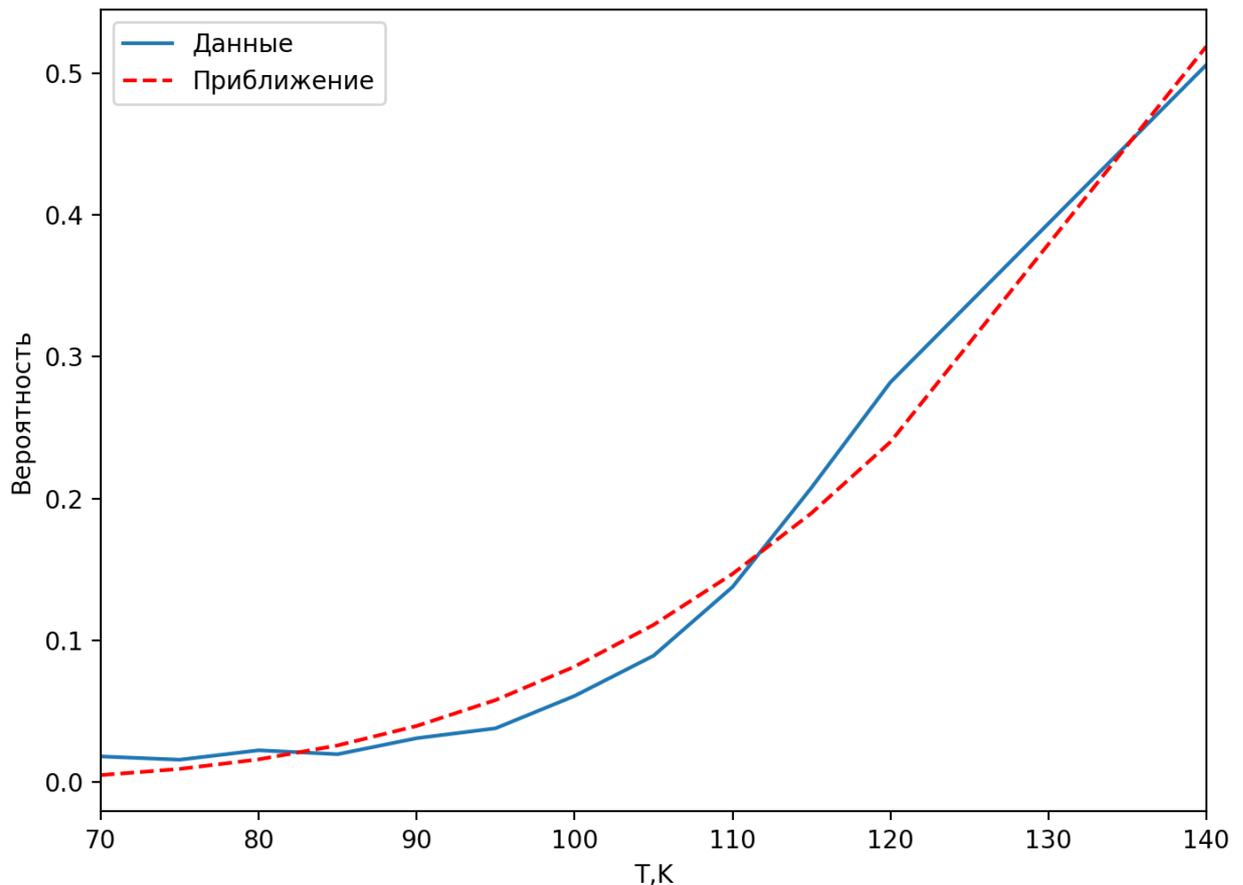


Рис. 3.3. Зависимость вероятности обнаружения атома вне цепочки при установлении равновесия. Пунктирной линией обозначена кривая, приближающая полученные данные по закону  $y = a e^{-b/x}$ , для которой  $a = 53.1 \pm 15.32$ ,  $b = 648 \pm 37$

Такая зависимость объясняется экспоненциальным возрастанием констант перехода в соответствии с законом Аррениуса. Среднее время между переходом системы из одного состояния в другое, в свою очередь, убывает по закону  $\tau \sim \exp(\frac{1}{T})$ .

### 3.2.1 Система с подвижными димерами

Рассмотрим теперь систему, в которой димеры способны диффундировать. При этом будем считать, что энергетические барьеры такого события равны барьерам для прыжка одиночного атома вдоль ступени,  $\Delta E_{dif} = 0.235 \text{ eV}$ . Остальные параметры модели остаются неизменными. Для удобства расчетов и интерпретации результатов примем  $T = 100\text{K}$ , так как на этой температуре еще наблюдается устойчивость атомных цепочек.

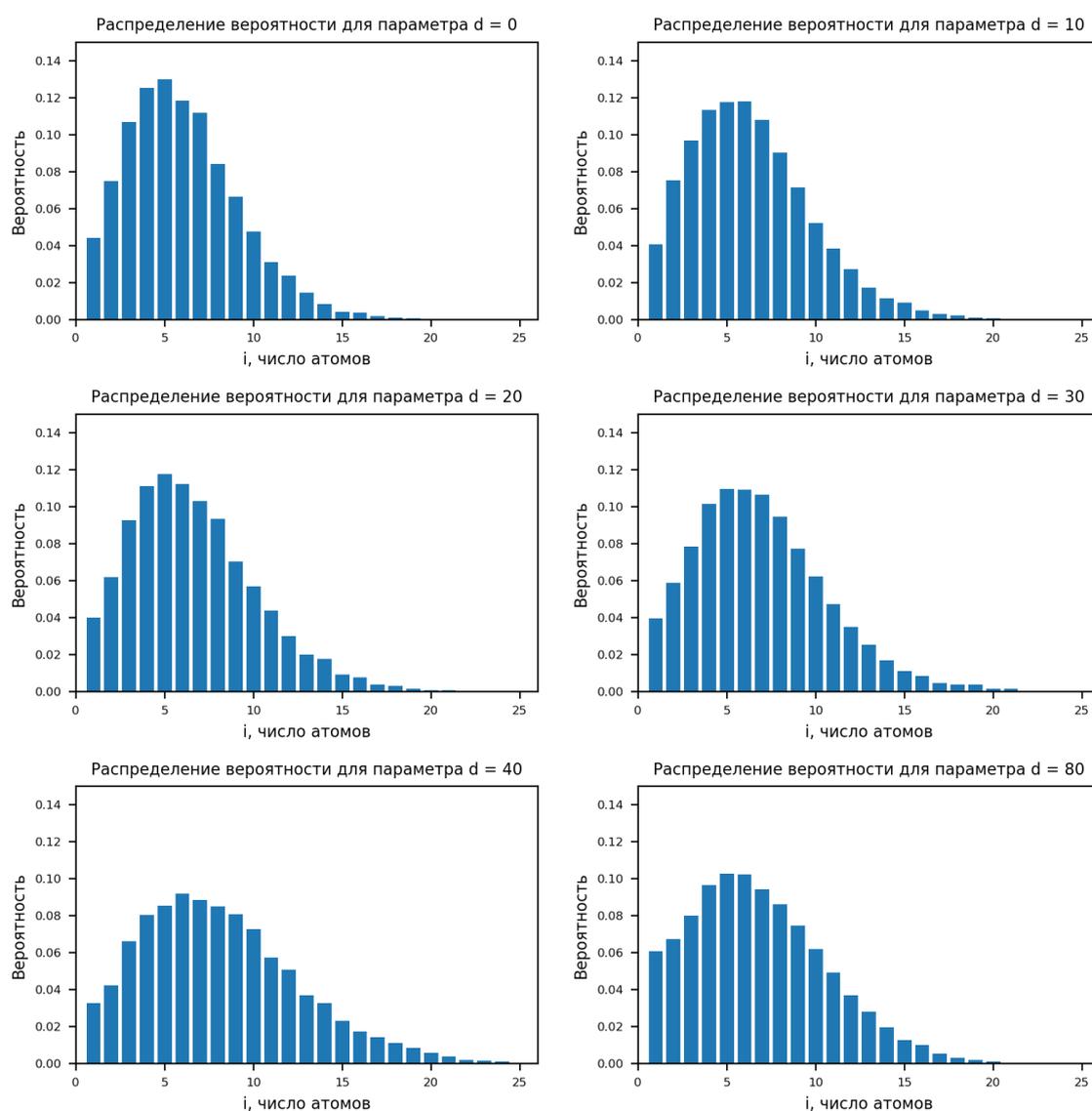


Рис. 3.4. Распределение длин атомных цепочек в системе с подвижными димерами в зависимости от параметра  $d$ , где  $d$  – количество напыленных перед началом каждого опыта димеров.  $T = 100\text{K}$  для всех гистограмм. Последний график описывает систему без подвижных димеров.

Из полученных распределений видно, что пик распределений незначительно смещается вправо в область более длинных цепей; среднее значение длины атомных цепочек увеличивается на 1 атом, при этом увеличивается количество цепей с длиной более 20 атомов. Но добавление дополнительных атомов на подложку уже должно увеличивать среднюю длину цепи, а особенно это справедливо для больших значений  $d$ ; поэтому в модельной системе вкладом подвижных димеров в смещение пиков распределений можно пренебречь.

### 3.2.2. Система с дефектами

В такой системе перед началом каждого модельного эксперимента на террасу в случайном порядке ставятся дефекты – неподвижные одиночные или двойные атомы.

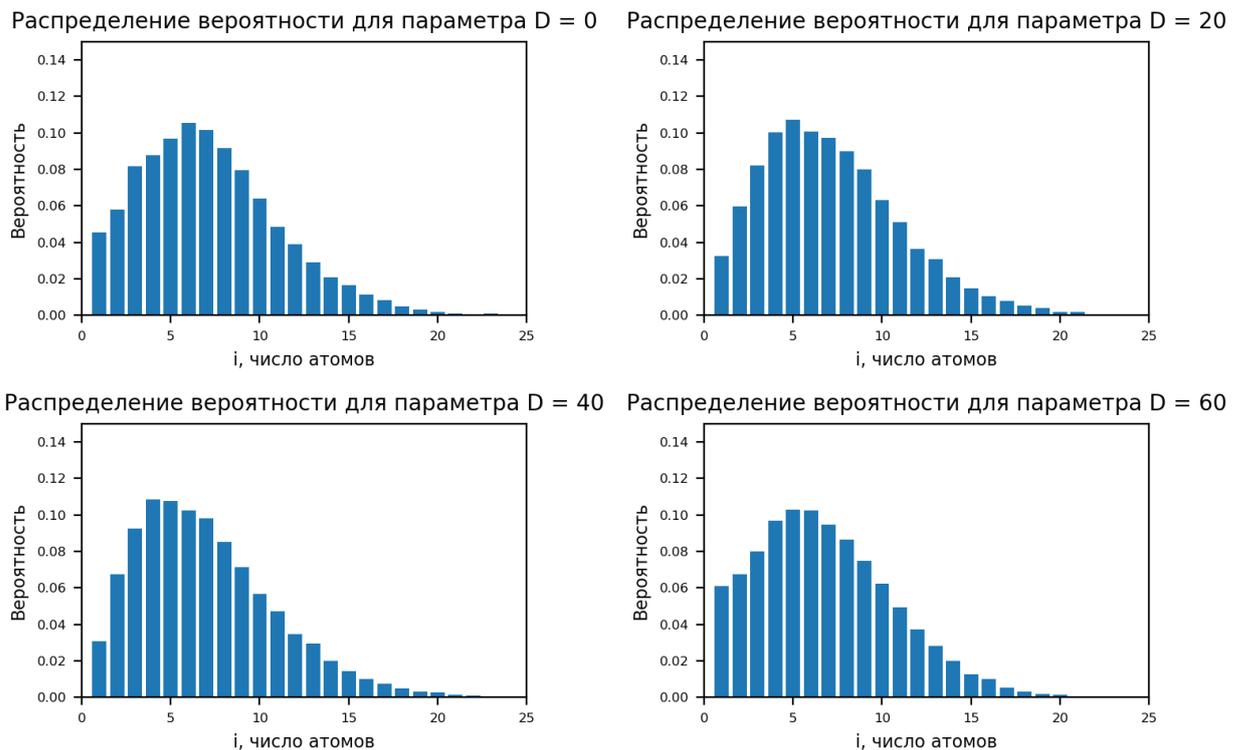


Рис. 3.5. Распределения длин атомных цепочек для систем с дефектами и без них (первая гистограмма).  $T = 100\text{K}$  для всех экспериментов. Количество дефектов определяется параметром  $D$ .

Пик гистограммы смещается в область коротких длин; среднее значение длины атомных цепей уменьшается до 4 атомов. Такой вид распределения можно объяснить тем, что дефекты выступают в качестве дополнительных центров роста, формируя вокруг себя провода небольших размеров. Так как дефекты разбросаны равномерно вдоль ступени, а энергетический барьер для отскока атома от цепи при  $T = 100\text{K}$  всё еще трудно преодолить, получается, что атомы находятся в ячейках, ограниченных соседними дефектами. Новый напыляемый атом сразу перемещается в такую ячейку и из-за недостатка энергии не может выбраться из неё; со временем он присоединяется к ближайшему дефекту. Так как дефекты преимущественно представляют собой пару атомов, то присоединением к ним слева и справа по атому можно получить цепь длиной 4 атома – наиболее вероятное значение длины в такой модели.

### 3.3. Сравнение полученных результатов с теорией и экспериментом

Так как образование атомных цепей является следствием многих случайных слабо взаимосвязанных событий, то длина цепи – тоже случайная величина, вклад в которую от каждого события незначителен. В таком случае, при увеличении числа наблюдений центрированное и нормированное распределение такой величины сводится к нормальному распределению.

На рисунке 3.6 представлено сравнение распределений длин цепочек для каждой из температур. Из этих графиков видно, что нормальное распределение для проведенного количества экспериментов  $N = 1000$  является хорошей аппроксимацией полученных данных.

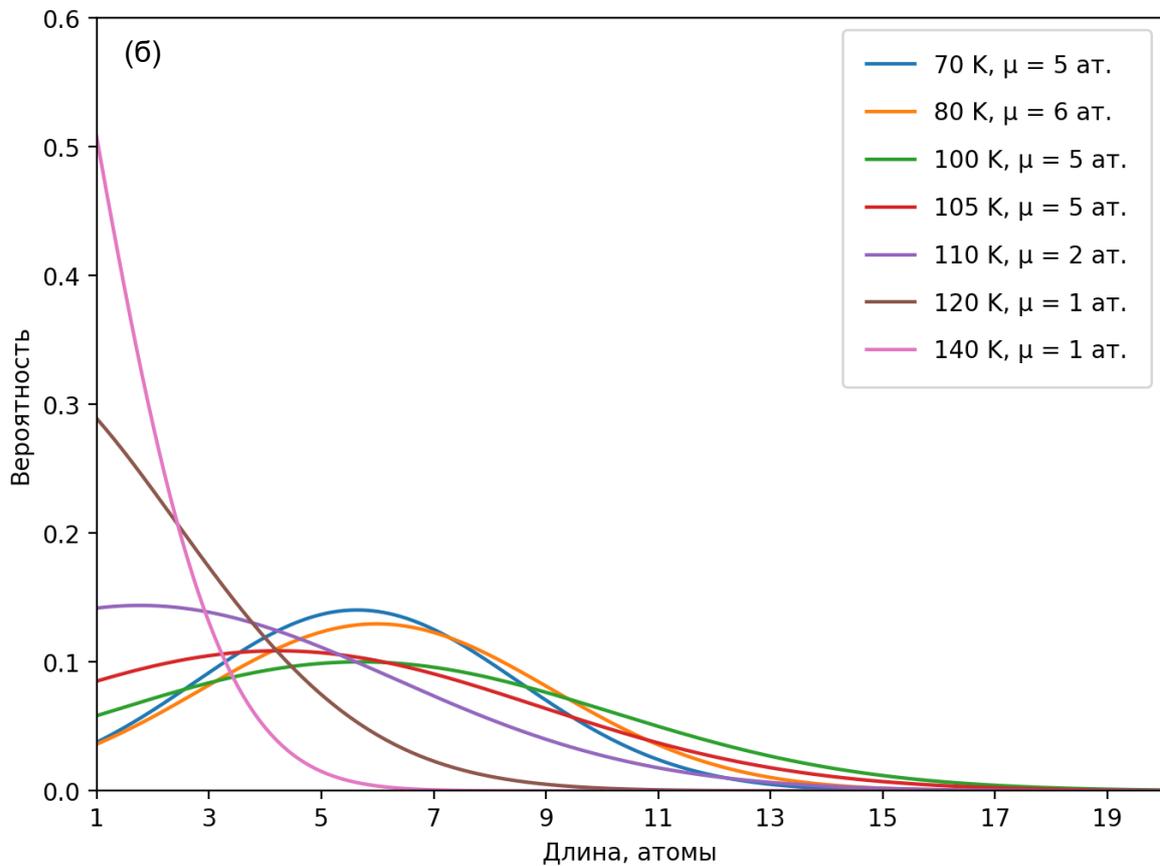
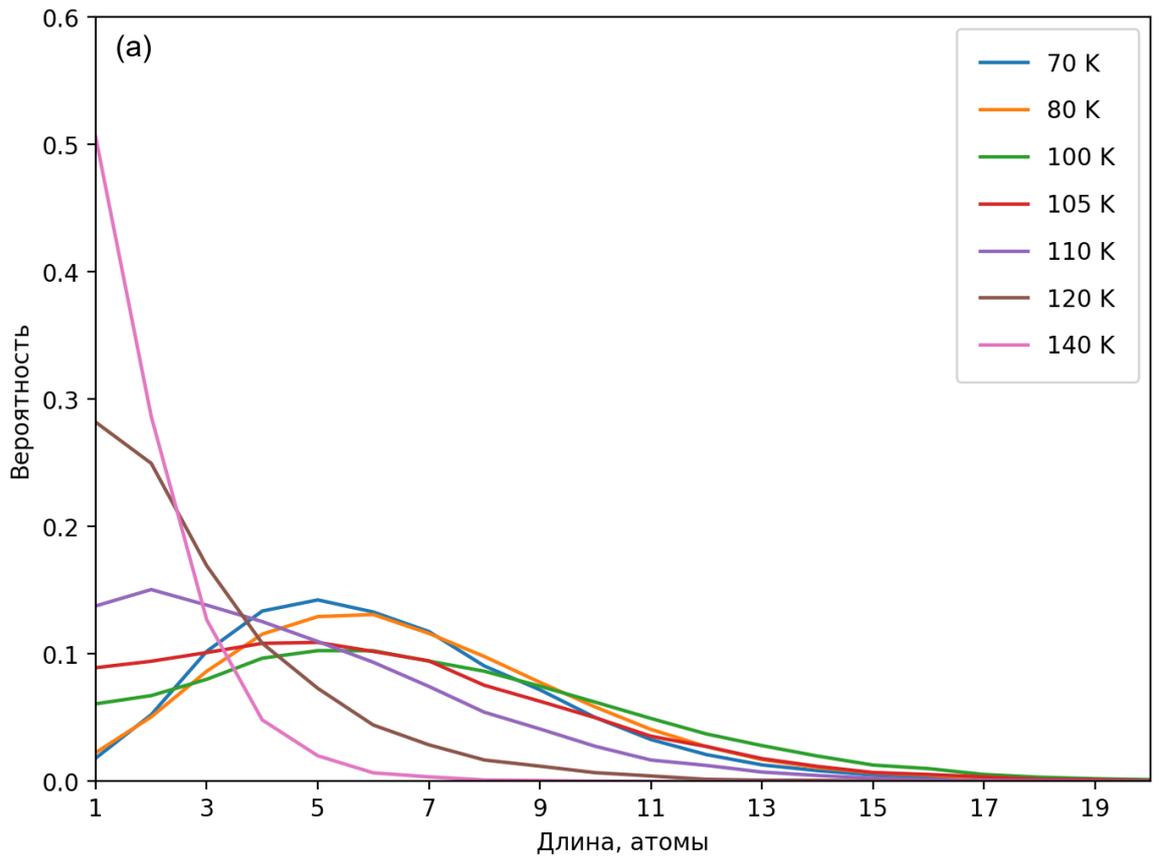


Рис. 3.6. (а) Исходные и (б) аппроксимированные распределения длин атомных цепочек в зависимости от температуры.  $\mu$  – средняя длина атомных цепочек.  $T_{кр} = 105$  К.

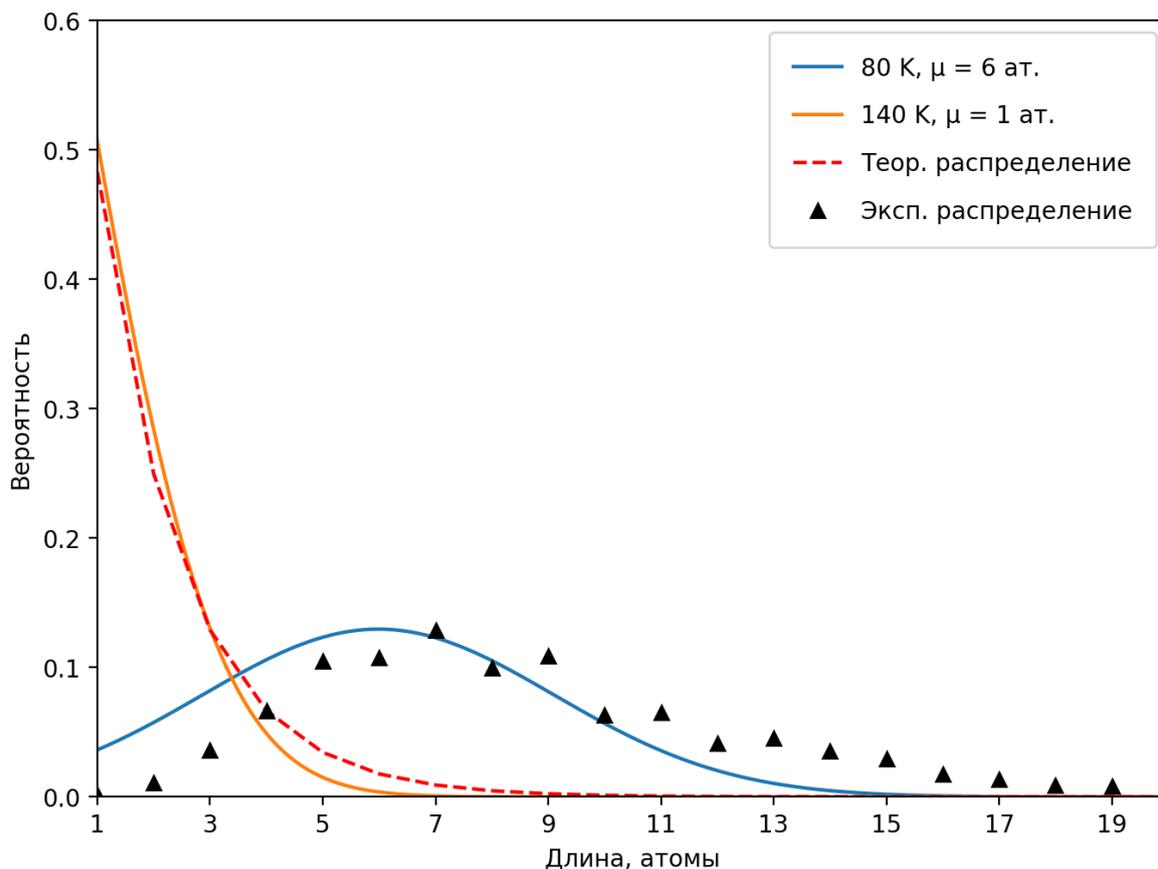


Рис. 3.7. Сравнение теоретического и экспериментального распределений. Сплошными линиями показаны результаты моделирования для .

На рисунке 3.7. представлено сравнение распределений, полученных непосредственно счетом атомных цепей на смоделированной террасе, с теоретическим и экспериментальным[1]. Из графика видно, что теоретическое распределение может описывать физические системы только с температурами выше критической, где вероятности формирования цепей уменьшаются экспоненциально с увеличением длины. Таким образом, распределение  $n_i$  представляет из себя частный случай для высоких температур; для  $T < T_{кр}$  необходимо учитывать более широкий круг явлений поверхностных явлений и отказываться от существующих предположений о независимости распределения от кинетических параметров, таких как температура.

Для экспериментального распределения статистика собрана с помощью СТМ изображений при температуре подложки 77 К. Наиболее вероятное значение длины цепочки в эксперименте равно 7 атомам. В смоделированном распределении средняя длина равна 6 атомам, что отличается от экспериментальных данных. Это может быть объяснено несколькими причинами. Во-первых, эксперимент проводился в условиях напыления атомов при  $T = 400\text{K}$ , дальше систему охлаждали, и она приходила в состояние

равновесия; в таких условиях могли иметь место эффекты, не рассмотренные в данной работе. Кроме того, не рассматривалось ни взаимодействие атомов друг с другом на расстоянии 2 и более мест, ни с атомами края ступени более высокой террасы. Также основные зависимости распределений от температуры получены в приближении, что димеры неподвижны, а дефектов нет. В реальных условиях есть и то, и другое, а дефекты разбросаны неслучайно, при этом за счет добавления новых центров и учета дальнедействующих сил между атомами появление длинных цепочек становится более вероятным.

# Выводы

- Показано, что распределение длин атомных цепочек серебра на поверхности Pt(997) имеет два характерных вида. Первый вид распределения имеет место при температуре поверхности  $T < T_{кр}$ , второй при  $T > T_{кр}$ .
- Обнаружено, что наличие у ступени дефектов уменьшает среднюю длину атомных цепочек, а учет диффузии димеров не влияет на вид распределения.
- Установлено, что модель одномерного газа для определения энергии связи применима только для случаев, когда температура поверхности  $T > T_{кр}$ , и атомные цепочки не являются стабильными. Поэтому экспериментальный метод определения энергии связи атомных цепочек не верен.

## Литература

- [1] P. Gambardella, H. Brune, K. Kern, and V. I. Marchenko Equilibrium island-size distribution in one dimension // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73, no. 3 – P. 245425.
- [2] V. I. Tokar and H. Dreyssé Lattice gas model of coherent strained epitaxy // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 68. – P. 195419.
- [3] V. I. Tokar and H. Dreyssé Analytical solution of a one-dimensional lattice gas model with an infinite number of multiatom interactions // *Phys. Rev. E.* – 2003. – Vol. 68 – P. 011601.
- [4] J. G. Amar, M. N. Popescu, and F. Family Rate-Equation Approach to Island Capture Zones and Size Distributions in Epitaxial Growth // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 86 – P. 3092.
- [5] J. G. Amar, M. N. Popescu, and F. Family Self-consistent rate-equation approach to irreversible submonolayer growth in one dimension // *Surf. Sci.* – 2001. – Vol. 491 – P. 239 – 254.
- [6] F. Picaud, C. Ramseyer, C. Girardet, and P. Jensen Confinement effects on the growth of adsorbates: Interpretation of the formation of monoatomic Ag wires on Pt(997) // *Phys. Rev. B* – 2000. – Vol. 61 – P. 16154.
- [7] P. Gambardella and K. Kern Ni growth on vicinal Pt(111): low temperature exchange and formation of ordered surface alloys // *Surf. Sci.* – 2001. – Vol. 475 – P. 229 – 234.
- [8] P. Gambardella, M. Blanc, K. Kuhnke, K. Kern, F. Picaud, C. Ramseyer, C. Girardet, C. Barreteau, D. Spanjaard, and M. C. Desjonquères Growth of composition-modulated Ag/Co wires on Pt(997) // *Phys. Rev. B* – 2001. – Vol. 64 – P. 045404.
- [9] F. J. Himpsel, J. E. Ortega, G. J. Mankey, and R. F. Willis Magnetic nanostructures // *Adv. Phys.* – 1998. – Vol. 47 – P. 511.

- [10] N. Nilius, T. M. Wallis, and W. Ho Development of One-Dimensional Band Structure in Artificial Gold Chains // *Science* – 2002. – Vol. 297. – P. 1853.
- [11] A. F. Voter Classically exact overlayer dynamics: Diffusion of rhodium clusters on Rh(100) // *Phys. Rev. B* – 1986. – Vol.34. – P. 6819.
- [12] P. Kratzer, Monte Carlo and Kinetic Monte Carlo Methods – A Tutorial, Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences, J. Grotendorst, N. Attig, S. Blügel, D. Marx (Eds.) // Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich, NIC Series – 2009. – Vol. 42.
- [13] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // *J. Chem. Phys.* – 1953. – V. 21. – P.1087.
- [14] J.R. Beeler Displacement Spikes in Cubic Metals. I.  $\alpha$ -Iron, Copper, and Tungsten // *Jr., Phys. Rev.* – 1996. – V. 150 – P. 470.
- [15] F.F. Abraham and G.W. White // *J. Appl. Phys.* – 1970. – Vol. 41 – P. 1841.
- [16] A.B. Bortz, M.H. Kalos, and J.L. Lebowitz A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems // *J. Comp. Phys.* – 1975. – Vol. 17. – P. 10.
- [17] K. Kuhnke and K. Kern Vicinal metal surfaces as nanotemplates for the growth of low-dimensional structures // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2003. – Vol. 15. – P. S3311.
- [18] <http://www.vasp.at/>
- [19] Y. Wang and J. P. Perdew Correlation hole of the spin-polarized electron gas, with exact small-wave-vector and high-density scaling // *Phys. Rev. B* – 1991. – Vol. 44. – P. 13298.
- [20] J. P. Perdew and Y. Wang Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy // *Phys. Rev. B* – 1992. – Vol. 45 – P. 13244.

- [21] G. Kresse and D. Joubert From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B – 1999. – Vol. 59 – P. 1758.
- [22] P. E. Blochl Projector augmented-wave method // Phys. Rev. B – 1994. – Vol. 50 – P. 17953.