

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

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

МАГИСТЕРСКАЯ РАБОТА

**Теоретическое исследование механических и квантовых свойств тонких
металлических пленок**

Выполнил студент

205м группы

Зеленский Владимир Сергеевич

подпись студента

Научный руководитель:

Старший преподаватель кафедры общей физики

к.ф.-м.н., Цысарь Ксения Михайловна

подпись научного руководителя

Допущен к защите ___ / ___ / _____

Зав. кафедрой

профессор Салецкий А.М. _____

подпись зав. кафедрой

Москва

2019 год

Содержание

Введение.....	3
1.Современное состояние исследований.....	7
1.1 Механические свойства тонких металлических пленок	7
1.2 Квантовые и оптические свойства тонких пленок.....	10
1.3 Механические и квантовые свойства одномерных структур на поверхностях тонких металлических пленок.....	12
2.Модель и метод исследования.....	18
2.1 Метод классической молекулярной динамики и традиционные представления статистической физики.....	18
2.2 Теория функционала электронной плотности.....	23
2.3 Уравнения Кона-Шэма.....	26
2.4 Расчет сил в элементарной ячейке.....	29
2.5 Метод псевдопотенциалов.....	30
2.6 Расчет оптических и проводящих свойств наноструктур.....	32
2.7 Описание модели.....	33
2.8 Цель исследования.....	37
3. Основные результаты и их обсуждение.....	38
3.1 Тонкие металлические пленки.....	38
3.1.1 Механические свойства тонких металлических пленок.....	38
3.1.2 Оптические свойства тонких металлических пленок.....	47
3.1.3 Влияние деформаций на оптические свойства тонких металлических пленок.....	48
3.2 Изучение процессов формирования одномерных наноструктур.....	50
3.2.1 Исследование процесса формирования атомного наноконтакта методом контролируемого разрыва металлической пленки.....	50
3.2.2 Изучение процессов формирования и стабильности одномерных нанопроводов на поверхности тонких пленок. Влияние деформаций на стабильность и свойства провода.....	55
Основные результаты и выводы работы.....	56
Список литературы.....	57

Введение

В последнее десятилетие особое внимание ученых и технологов уделяется разработке новых методов миниатюризации электроники, и к настоящему времени в данном направлении достигнут значительный прогресс. Сегодня уже эффективно формируют наноразмерные провода и системы квантовых точек на различных подложках, тонкие наноразмерные металлические пленки эффективно используют в системах записи и хранения информации, в устройствах магнитной памяти, в системах спинового токопереноса. Следует отметить, что в качестве подложек для прототипов наноразмерных магнитных схем часто выбирают пленки немагнитных металлов (медь, золото), обладающих высокой симметрией кристаллической решетки, плотной упаковкой атомов на поверхности, что позволяет свободно формировать на них любые наноразмерные системы и устройства [1,2,3]. Кроме того, тонкие немагнитные металлические пленки часто используются в устройствах поглощения электромагнитного излучения, в системах, где важным является именно толщина и размер поглощающего слоя. Недавнее исследование показало возможность использования многослойных диэлектрических наноструктур, с прослойками из тонкой пленки металла, в качестве сверхбыстрых модуляторов оптического излучения. [4] Уже доказано, что использование тонких пленок в системах фотоячеек солнечных батарей способно значительно увеличить их КПД [5,6]. Японские ученые в 2018 году [5] предложили новый класс солнечных батарей – плазмонные солнечные батареи – в которых увеличение поглощения в кремниевом слое достигается многократным отражением и рассеянием света на плазмонах поверхности тонкой Ag-Cu пленки и его повторным рассеянием в кремниевый слой. Важным в данном случае становится изучение спектров поглощения пленок, для оптимального выбора пленки с указанным рабочим диапазоном солнечной батареи. Основное внимание при этом уделяется исследованию квантовых свойств поверхностных наносистем или поглощающих и

проводящих свойств пленок. Поглощающие и проводящие свойства металлических пленок активно исследуются с целью создания сверхтонких покрытий электромагнитной защиты. В этом отношении наиболее важным представляется изучение спектров поглощения электромагнитных волн в тонких пленках и подбор оптимального компонентного состава пленки с максимальной интенсивностью поглощения на заданной частоте [7]. Кроме того, не менее важной является задача облегчения конструкции покрытия и поиск максимального соотношения между толщиной покрытия и эффективностью поглощения падающего излучения. Тонкие пленки серебра и других благородных металлов требуют более детального изучения, так как могут быть использованы как низкорепактивные многофункциональные покрытия, при этом обладающие необычными проводящими и поглощающими свойствами [8]. Многие теоретические и экспериментальные работы направлены на изучение спектров поглощения пленок в различных диапазонах излучения. Однако, оптические свойства металлических пленок и их зависимость от толщины и размерности пленок изучены недостаточно [9]. В мировой литературе практически нет работ, посвященных изучению зависимости оптических свойств пленок от ее размерности и толщины.

Еще одна важная проблема физики низкоразмерных систем - изучение квантового размерного эффекта [10,11], который представляет собой сильную зависимость квантовых свойств нанобъектов от их размерности, толщины, длины, и других размерных параметров структуры [11-13]. Данная проблема интенсивно исследуется теоретически и экспериментально [11,12]. Особое влияние размера на квантовые свойства системы возникает при условии, что одно из измерений структуры становится сравнимым с фермиевской длиной волны электрона. Для переходных и благородных металлов, к примеру, фермиевская длина волны порядка 50 нм. Данное условие соблюдено для тонких металлических пленок, поэтому изучение влияния толщины пленки на их оптические или проводящие свойства становится наиболее важным направлением физики наноструктур [12,13]. Квантовый размерный эффект

уже обнаружен в золотых и калийных тонких пленках [14,15]. Лареф предсказал [16] взаимосвязь между поглощающими свойствами тонких золотых пленок и их толщиной. Кузик [17,18] наблюдал в эксперименте периодические осцилляции оптической проводимости тонких пленок в зависимости от их толщины в структурах Nb, Cu, Mo, W, Ni и Ti, что также связал с квантовым размерным эффектом. Минг обнаружил зависимость поглощающих свойств тонких пленок Ag от толщины [19]. Наше недавнее исследование также обнаружило зависимость квантовых поглощающих свойств серебряных пленок от толщины [7,9]. Следует отметить работу М. Лиу по изучению размерного эффекта и влияния деформаций на рост и стабильность свинцовых нанопленок методом первопринципной молекулярной динамики [20]. В работе исследуется взаимосвязь между толщиной пленки и ее упругими характеристиками, проводится сравнение результатов расчета поверхностной энергии с экспериментальными данными.

Наконец, характеристики наносхем, электронные свойства приповерхностных низкоразмерных структур (нанопроводов, квантовых точек, нанопленок) сильно зависят от атомной структуры и геометрии подложки. Наноконтакты, нанопровода и нанокластеры (квантовые точки) являются сильно неоднородными системами, которые характеризуются неоднородным распределением упругих напряжений в структуре [21,22]. Поэтому даже малые деформации подложки могут привести к изменению свойств данных наносистем, а также к необратимым изменениям в функционировании поверхностных наносхем на их основе. К примеру, даже незначительные деформации подложки и тем более нарушение целостности структуры поверхностного слоя пленки способны привести к разрыву поверхностных наноконтактов или нанопроводов. Исследование критических характеристик одномерных систем было проведено в работе Санкаранараянана и др., в которой была обнаружена сильная зависимость квантовых свойств смешанных нанопроводов Pd-Pt от внешних механических напряжений, а также была оценена стабильность нанопроводов и

наноконтактов под действием упругой продольной нагрузки [23]. Важно отметить, что подложка может существенно влиять на механические и прочностные характеристики ультратонких пленок, нанопроводов и наноконтактов. Показано, что прочность на разрыв нанопровода Au-Mn на подложке из меди на 2 порядка превосходит прочность свободно висящего нанопровода. Это связано с образованием дополнительных гибридных связей атомов нанопровода с атомами подложки.

Представленная работа посвящена изучению упругих свойств немагнитных медных и серебряных тонких пленок, расчету критических значений продольных напряжений, приводящих к разрушению структуры поверхности, а также расчету значений продольных напряжений, соответствующих переходу пленок из области упругих деформаций в область пластичности. В работе исследуются квантовые оптические свойства тонких металлических пленок, спектры поглощения и проводимости пленок, а также влияние механических деформаций на эти характеристики. Кроме того в работе проводится изучение влияния размерности на квантовые свойства наноструктур на примере процесса формирования одномерных наноконтактов при сильном растяжении металлической пленки, проводится исследование перехода «2D-1D» система на примере перехода «нанопленка-нанокontakt». В последней части работы исследуется влияние структуры пленки на атомные свойства поверхностных нанопроводов. **В работе** проведено комплексное исследование квантовых и механических свойств немагнитных тонких металлических пленок 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.

1.1. Механические свойства тонких металлических пленок

Главной целью представленной работы стало изучение свойств тонких пленок металла. Сегодня существует большое количество различных экспериментальных методов получения и исследования тонких металлических пленок. В настоящее время стало возможным формирование ультратонких металлических пленок толщиной меньше 1 нм. Основные методы формирования тонких металлических пленок можно разделить на две группы: физические и химические методики. Физические способы формирования основаны на движении вещества пленки от источника к подложке с последующей конденсацией (осаждением) и образованием целостного покрытия (пленки). В основе химических методов лежит осаждение жидкофазных или газообразных прекурсоров и образование пленки в результате химических превращений прекурсоров на поверхности подложки или в непосредственной близости от нее. К физическим методам изготовления тонких пленок можно отнести вакуумные методы осаждения. Такие методы осаждения пленок отличаются способами генерации газовой фазы, режимами и условиями массопереноса и пленкообразования. Одним из таких методов является резистивное термическое испарение (Resistive Thermal Evaporation). Этот процесс использует электрическую энергию для нагрева испаряемого материала до такой температуры, при которой его атомы достаточно быстро испаряются. Процесс осуществляется в высоком вакууме, что позволяет увеличить длину свободного пробега атомов и получать наиболее чистые пленки. Схема процесса представлена на Рис.1. Методом резистивного испарения получают металлические покрытия из Al, Ag, Cu, Zn, Cd, Cr, Ni, Co, Si. Особенности метода резистивного термического испарения подробно изложены в работе Ричарда [24]. Однако, основной проблемой методов осаждения при создании тонких металлических пленок становится

формирование островковой или дендритной структуры на начальном этапе формирования пленки при малом количестве напыленных атомных слоев. К примеру, тонкие пленки меди получены в работе [25] методом термического испарения толщиной от 200нм до 400нм.

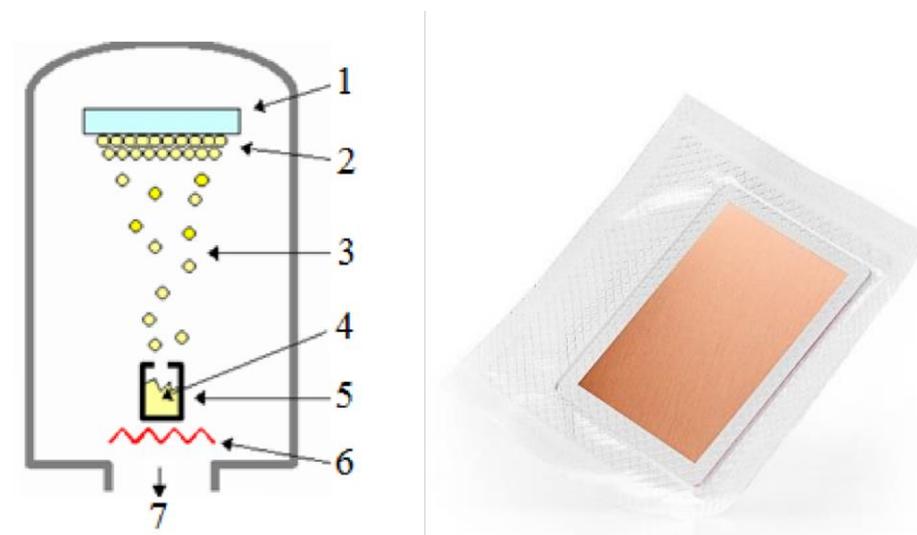


Рис. 1 Схема вакуумной камеры для резистивного термического испарения и полученная пленка на подложке 1-подложка, 2-осаждаемая пленка, 3-газообразный материал пленки, 4-испаряемый материал, 5-испаритель, 6-нагреватель, 7-выход к вакуумному насосу

Параллельно развиваются методы химического формирования пленок, такие процессы не требуют условия высокого вакуума, что позволяет упростить технологический процесс и уменьшить стоимость пленок. С помощью химических технологий изготовления пленок можно легко получать структуры сложного состава с высокой степенью гомогенности и с возможностью контролировать их состав и морфологию. Химические методы формирования пленок в свою очередь разделяют на две группы, по типу осаждаемых прекурсоров: газообразных и жидких. Сложность данной методики в подборе прекурсоров и материала подложки для создания ровной поверхности пленки.

После создания первичной пленки структура ее поверхности может быть модифицирована методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ),

одновременно с процессом формирования пленки СТМ-методика позволяет проводить исследования атомного строения тонких пленок. В результате изучения поверхности пленок *in-situ* уже обнаружен ряд значимых явлений, в том числе кластеризация поверхности или островковая структура поверхности пленки. Много работ посвящено изучению процессов напыления пленок, компьютерному моделированию каждого этапа создания пленки. Существуют работы, посвященные исследованию геометрии и квантовых свойств кластеров (островков), которые образуются при напылении малого числа атомных слоев в процессе создания целостной структуры пленки. Островковая структура формируется в процессе формирования тонких пленок из атомов переходных и благородных металлов, которые в свою очередь наиболее удобны при создании низкорективных тонких покрытий, не взаимодействующих с внешней средой. Проблема выбора оптимальной методики напыления для создания сверхтонких пленок сегодня занимает одно из первых мест в исследовании механических и атомных свойств тонкопленочных систем. Одно из выделенных направлений – это поиск критических размеров пленки, при которой островковая структура пленки пропадает. В отдельное направление выделяется исследование внешних макропараметров пленки, изменение которых связано с процессом агрегации островков и с процессом формирования целостной структуры пленки. Следует также отметить, что в литературе практически нет работ, посвященных исследованию влияния деформации подложки на тонкие пленки и на процесс их формирования, а также отсутствуют работы по изучению свойств деформированных пленок. Основной целью представленной работы стало изучение свойств деформированных пленок и поиск размерных эффектов в зависимости физических характеристик пленки от толщины. Результатом исследования должно стать комплексное изучение свойств целостных пленок металлов для дальнейшего сопоставления полученных результатов с результатами экспериментальных работ с целью выявления предельной

толщины, при которой свойства пленки определяются двумерным характером атомных связей и взаимодействий в системе.

1.2. Квантовые и оптические свойства тонких пленок.

Оптические свойства металлов на протяжении тысячелетий, одним из самых известных примеров является посеребренное стекло зеркал. Есть менее примечательные примеры такие как цветные стекла, которые берут свой цвет из плазмонного резонанса в металлических наночастицах [27]. Главным оптическим свойством металлов является их высокая отражательная способность, с самыми высокими наблюдаемыми значениями является серебро. Большинство оптических свойств могут сильно зависеть от морфологии поверхности с шероховатостями которые приводят к производству более блестящих или матовых покрытий. Есть некоторые металлы, такие как никель, которые имеют природно-низкую отражательную способность в видимом свете, что делает его хорошим материалом для солнечных поглотителей. В совокупности с оптическими свойствами, для солнечной энергетики требуются материалы с хорошими высокотемпературными характеристиками.

Недавнее исследование показало возможность использования многослойных диэлектрических наноструктур, с прослойками из тонкой пленки металла, в качестве сверхбыстрых модуляторов оптического излучения. [17] Уже доказано, что использование тонких пленок в системах фотоячеек солнечных батарей способно значительно увеличить их КПД [1,2]. Японские ученые в 2018 году [1] предложили новый класс солнечных батарей – плазмонные солнечные батареи – в которых увеличение поглощения в кремниевом слое достигается многократным отражением и рассеянием света на плазмонах поверхности тонкой Ag-Cu пленки и его повторным рассеянием в кремниевый слой. Важным в данном случае становится поиск металлических пленок с максимальной интенсивностью поверхностных состояний и изучение

спектров поглощения света, для оптимального выбора пленки с указанным рабочим диапазоном солнечной батареи.

Много теоретических и экспериментальных работ посвящено изучению оптических спектров и характеристик тонких металлических пленок.

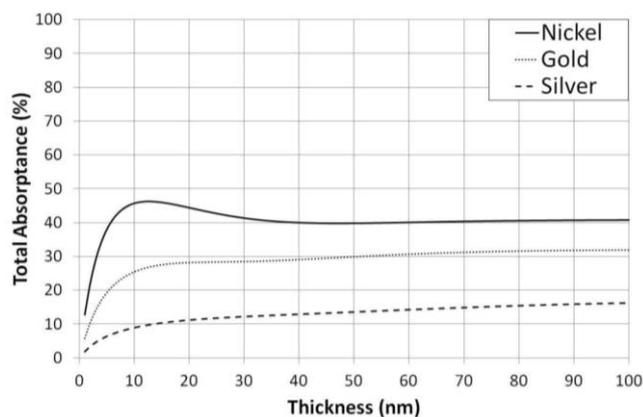


Рис. 2 Суммарное солнечное поглощение для Ni, Au и Ag пленок от толщины

Следует отметить ряд значимых работ по изучению спектральных характеристик тонких металлических пленок. Это и работа Ахмада и Стоукса [28] по изучению зависимости поглощающих свойств тонких пленок никеля, серебра и золота от размера пленок, и теоретическая работа М.Лиу по изучению размерного эффекта и влиянию деформаций на рост и стабильность свинцовых нанопленок методом первопринципной молекулярной динамики [20]. В данной теоретической работе исследуется взаимосвязь между толщиной пленки и упругими константами (модуль Юнга, стресс) пленок, также проводится сравнений результатов расчета поверхностной энергии с экспериментальными данными. Изучение зависимости оптических коэффициентов от размеров пленок было проведено в работе [8]. В ходе расчетов для серебряных пленок разной толщины было выявлено уменьшение

пика поглощения коэффициента k в диапазоне высоких энергий, а также слабое усиление в низкоэнергетической области.

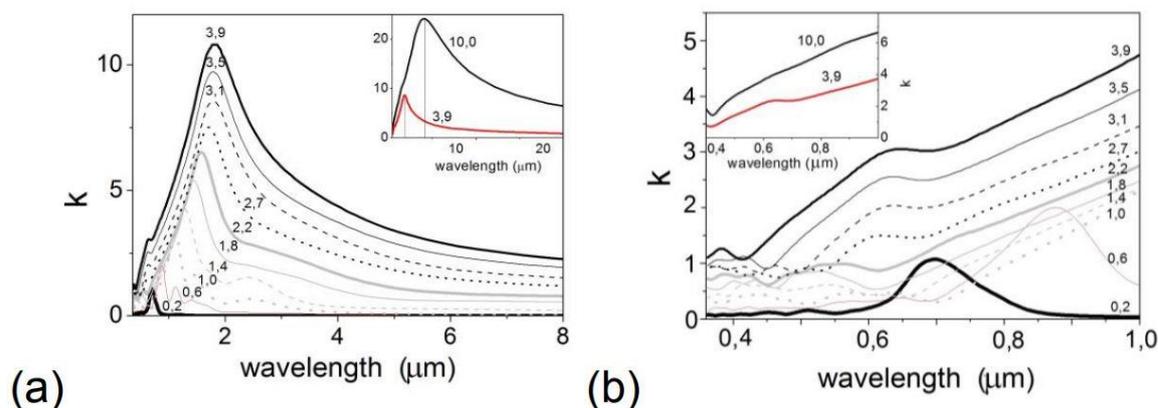


Рис. 3 Зависимость коэффициента поглощения k от длины волны в ИК (а) и в видимом диапазоне (б). Цифры возле кривых соответствуют толщине пленки в нм.

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

Следует также отметить, что тонкие пленки являются удобным структурами для формирования одномерных систем. Многочисленные экспериментальные работы по формированию и изучению свойств пленок позволили выделить новый способ создания одномерных наноструктур – наноконтактов и нанопроводов. Было обнаружено, что сильное продольное растяжение пленки помимо искажения структуры ее поверхности, способно привести к формированию тонкого атомного перешейка в пленке и при дальнейшем растяжении пленки к формированию атомного контакта (наноконтакта) в месте разрыва. На данной методике основан МКРК (метод контролируемого разрыва контакта), который часто используется при создании одномерных наноконтактов и нанопроводов для исследования их свойств и прочностных характеристик. На Рис. 4 схематично представлен

процесс формирования контактов методом контролируемого разрыва цельной металлической пленки. Детальное исследование и предсказание возможных физических свойств наноконтактов, является важной задачей, как для теоретической, так и для экспериментальной физики низкоразмерных структур, так как одномерные структуры (наноконтакты и нанопровода) являются составляющими элементами наносхем.

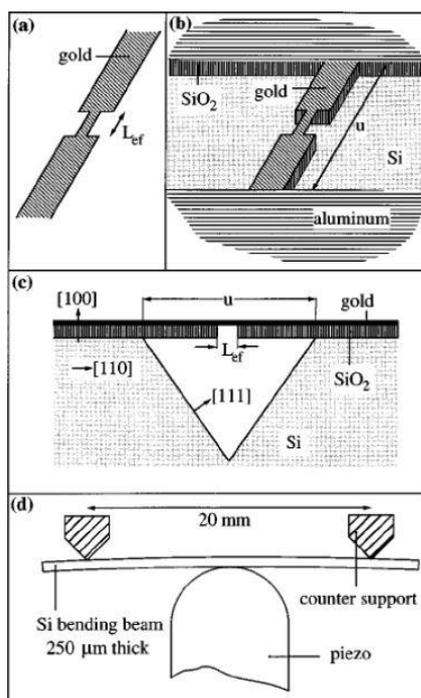


Рис. 4 Схема образования наноконтактов

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. Основные характеристики свободных наноконтактов и нанопроводов (прочность, критические напряжения и межатомные расстояния, атомная и электронная структура, магнитные и проводящие характеристики) в значительной степени связаны с внутриатомным взаимодействием в структуре контакта. При этом свойства свободных наноконтактов и атомных цепочек, обусловленные межатомным внутрицепочечным взаимодействием, сохраняются для приповерхностных

наноструктур, сформированных на поверхностях подложек тонких пленок, потому изучение свойств свободных контактов и нанопроводов необходимо для дальнейшего изучения свойств поверхностных наносхем и для дальнейшего создания наноустройств, построенных на их основе. Анализ внутрицепочечного взаимодействия важен для предсказания возможных свойств нанопроводов (проводимость, квантовый магнетизм) и свободные наноконтакты один из эффективных способов исследования.

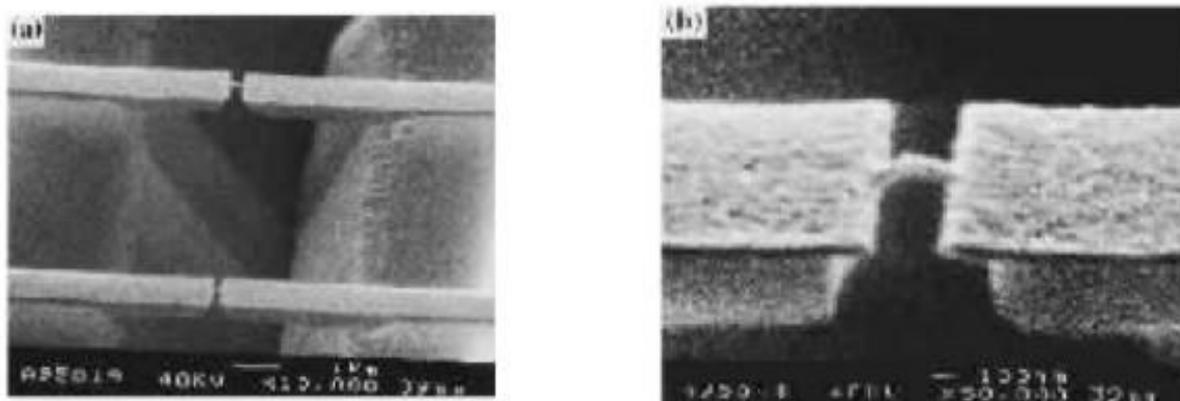


Рис.5 Формирование Au наноконтактов методом МКРК

При этом устойчивость и стабильность приповерхностных наносхем и наноразмерных устройств во многом зависит и от свойств самой подложки. 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 комплексное исследование механических и квантовых свойств систем типа «провод-подложка» является сегодня наиболее важной задачей нанoeлектроники, спинтроники, фотоники и других смежных областей физики. В отдельное направление следует выделить изучение влияния упругих деформаций на стабильность и квантовые свойства одномерных поверхностных систем, изучению данной проблемы посвящена последняя глава дипломной работы.

Именно одномерные структуры наиболее эффективно используются сегодня в устройствах нанoeлектроники. Одним из успешных направлений миниатюризации нанoeлектроники 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 [26]. 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 на подложках в виде линейного провода, обладающего 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.

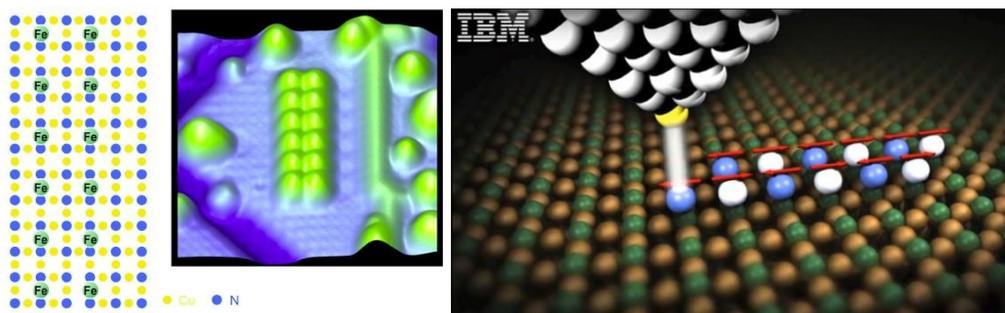


Рис.6 Структура из 12 атомов железа на азотированной поверхности меди CuN, полученная в IBM Lab's.

В описанном эксперименте IBM на поверхности CuN формируются железные цепочки, в которых в рамках представленного эксперимента удалось стабилизировать антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов атомов железа. Важно при этом точно определять основные свойства самой подложки и уметь предсказывать зависимость атомных свойств нанопровода от тепловых и механических деформаций подложки, так как даже незначительные изменения структуры подложки способны сильно влиять на магнитные свойства провода для систем с характерным размером порядка нескольких атомных радиусов, вплоть до полного их разрушения. Исследования свойств одномерных проводов на различных подложках

сегодня ведутся многими лабораториями мира. Например, в работе [13] были изучены энергетические свойства смешанных Au-Mn нанопроводов на поверхности медных и кремниевых подложек. В работе показано влияние структуры поверхности подложки на магнитные и энергетические свойства проводов сформированных на их поверхности с целью определения условий для увеличения стабильности таких нанопроводов. В таблице (рис. 7) приведены значения энергий нанопровода в ферромагнитном (FM) и антиферромагнитном (AFM) состояниях на поверхности, а также значение энергии для свободного нанопровода.

	FM	AFM	ΔE
$E_{\text{NW-Cu(110)}}, \text{eV}$	-171.518	-171.552	0.034
$E_{\text{NW-Cu(111)}}, \text{eV}$	-205.604	-205.621	0.017
E_{NW}, eV	-20.560	-20.582	0.022
$\mu_{\text{NW-Cu(110)}}, \mu_{\text{B}}$	0.06	0.05	—
$\mu_{\text{NW-Cu(111)}}, \mu_{\text{B}}$	0.1	0.05	—
$\mu_{\text{NW}}, \mu_{\text{B}}$	4.35	4.4	—

Рис. 7 Значения полной энергии и магнитных моментов для FM и AFM конфигураций и их разность для Au-Mn провода на поверхностях Cu(110), Cu(111) и для свободного провода.

Однако, и в этой работе, как практически во всех работах по изучению поверхностных наноструктур, не рассматривается влияние деформации подложки на свойства провода.

В представленной работе проведено комплексное исследование влияния деформаций на свойства свободных одномерных систем, и на системы типа «провод-подложка».

2. Модель и метод исследования

2.1 Метод классической 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. Полная информация о системе содержится в волновой функции вида

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

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 [29]. 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 на порядок устойчивее более 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:

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

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

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

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 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 срелаксирована).

Для расчетов, представленных в данной работе, используется программа LAMMPS, в которой реализован метод КМД. Для расчетов используются потенциалы базы Material Measurment 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 однородном электронном газе. Энергия, связанная с добавлением атома в систему, входит как составная часть в выражение для полной энергии системы. Как показано в работе Нормана [29], 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 пленок и приповерхностных наноструктур 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:

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

(12)

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

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, как следующего приближения, вводятся в теории Томаса-Ферми [30]. Любая молекулярная или кристаллическая структура в данной теории представляется в виде электронной жидкости. 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 системы. Метод Томаса-Ферми – метод прямого нахождения электронной плотности 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 свойства системы, позволяет рассчитывать с высокой точностью энергию атомов, но в вопросах химии и материаловедения, данная теория даёт ошибочные результаты, например, при расчете химических связей в системе. 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.8.



Рис. 8 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:

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

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.

2.5 Метод псевдопотенциалов

В данной работе для решения уравнения Кона-Шэма используется метод псевдопотенциала. В основу метода псевдопотенциалов положено утверждение, что при изменении окружения атома остовные электроны не меняют своих волновых функций, меняется только состояние валентных электронов [31]. То есть и в случае монокристаллического массива, и в случае поверхностного слоя они должны одинаково хорошо описывать атом. Тогда влияние остовных электронов на валентные описывается введением добавочного потенциала к потенциалу ядра. Вместо реальной системы теперь исследуется как бы псевдоатом. Волновые функции валентных состояний должны быть эквивалентны волновым функциям реальной системы. И не должно появляться нефизических состояний для валентных электронов. Также метод псевдопотенциала значительно упрощает расчет. Для того, чтобы найти волновые функции стационарных состояний валентных электронов, необходимо разложить их по какому-либо базису и подставить в уравнение Кона-Шэма. Трудность в выборе базиса заключается в том, что вдали от ядра валентные электроны почти свободны, поэтому правильнее всего рассматривать их в базисе плоских волн, но вблизи ядра остовные электроны сильно влияют на состояния валентных электронов. Волновые функции остовных электронов вблизи ядра являются быстроосциллирующими, вдали же они практически равны 0, следовательно, они очень похожи на атомные волновые функции. Вблизи ядра волновая функция быстро осциллирует, и кинетическая энергия электрона может достигать очень больших значений.

Валентный электрон не может подойти близко к ядру, его вытесняют из этой области остовные электроны. Следовательно, можно выбрать псевдопотенциал так, чтобы вблизи ядра он давал гладкую волновую функцию, а вдали точно соответствовал волновой функции реальной системы (рис.9) [32].

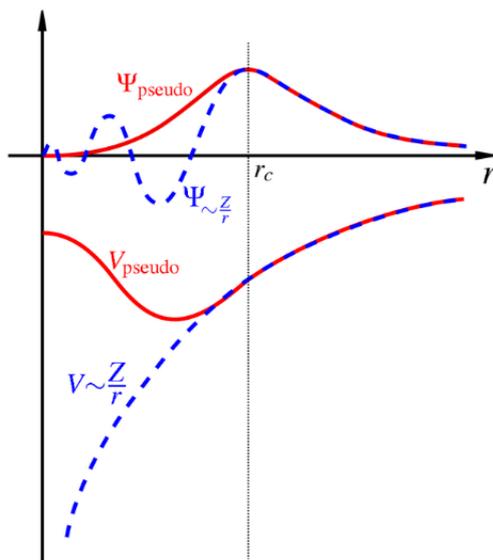


Рис. 9 Псевдоволновая и полноэлектронная волновые функции - вверху. Псевдо- и реальный потенциал - внизу

2.6 Расчет оптических и проводящих свойств наноструктур

Для расчета оптических свойств пленок, необходимо вычисление коэффициента поглощения среды, который может быть посчитан из тензора комплексной диэлектрической проницаемости системы. Реальная и мнимая части диэлектрической проницаемости высчитываются в программном пакете VASP. После определения энергии основного состояния системы и определения всех допустимых энергетических уровней рассчитывается тензор диэлектрической проницаемости системы:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_{c,v,\mathbf{k}} 2w_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon_{c\mathbf{k}} - \varepsilon_{v\mathbf{k}} - \omega) \times \langle u_{c\mathbf{k}+\mathbf{e}_{\alpha}q} | u_{v\mathbf{k}} \rangle \langle u_{c\mathbf{k}+\mathbf{e}_{\beta}q} | u_{v\mathbf{k}} \rangle^*, \quad (31)$$

где индексы c и v относятся к проводящим и валентным состояниям системы, $u_{c\mathbf{k}}$ периодическая часть волновой функции состояния (орбитали) в точке \mathbf{k} обратного пространства волновых векторов. Действительная часть диэлектрической проницаемости рассчитывается через соотношения Крамерса-Кронига

$$\varepsilon_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega') \omega'}{\omega'^2 - \omega^2 + i\eta} d\omega', \quad (32)$$

Тензор диэлектрической проницаемости определяется суммой всех прямых разрешенных переходов в каждой \mathbf{k} точке по заданной сетке в обратном пространстве волновых векторов между полученными допустимыми состояниями системы. Реальная и мнимая компоненты коэффициентов поглощения и преломления среды n и k могут быть посчитаны из реальной ε_1 и мнимой ε_2 частей диэлектрической проницаемости системы:

$$\begin{aligned}
 n(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon_1(\omega) + \sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2}}{2}} \\
 k(\omega) &= \sqrt{\frac{-\varepsilon_1(\omega) + \sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2}}{2}}
 \end{aligned}
 \tag{33}$$

2.7 Описание модели

В данной работе проведено комплексное двухуровневое исследование свойств атомной и электронной структуры тонких металлических пленок и одномерных наноконтактов, как структур, формирующихся в местах атомных перешейков, при сильном растяжении пленок. Поэтому в расчетах мы использовали две модели для вычислений свойств двумерных структур пленок и одномерных наноструктур наноконтактов, одну для вычислений в рамках КМД (LAMMPS) и другую при точных расчетах квантовых свойств наносистем (VASP).

В рамках расчетов атомной структуры и релаксации атомов в пленке, при моделировании процессов ее формирования и деформации с использованием программного пакета LAMMPS в работе формировалась трехмерная ячейка с периодическими граничными условиями, размер ячейки $10a \times 10a \times 15a$, где a – параметр решетки (для Cu $a=3,615 \text{ \AA}$, для Ag $a=4,09 \text{ \AA}$). Время релаксации системы 80000пс и временной шаг при растяжении 10пс. Движение атомов в нижнем слое заморожено, для имитации пленки на подложке.

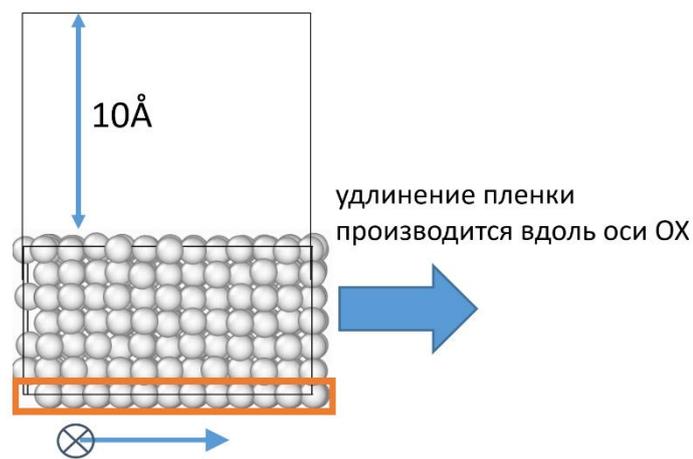


Рис. 10 Модель ячейки для расчетов методом КМД

Для исследования квантовых свойств наносистем с использованием программного пакета VASP использовалась специальная суперячейка с наложенными периодическими граничными условиями Борна-Кармана вдоль трех направлений.

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 посредством трансляций. В первопринципном коде VASP в качестве условия трансляции используются граничные условия Борна-Кармана:

$$\Psi(\vec{r} + \vec{T}) = \Psi(\vec{r}) \quad (34)$$

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.

При исследовании свойств двумерных пленок ячейка заполнялась атомами с сохранением 10нм слоя без атомов, моделирующего пустое

пространство, с толщиной большей длины волновой функции электрона, для исключения взаимодействия между атомами пленки и атомами образа при трансляции. Для интегрирования в обратном пространстве задавалась специальная сетка k-точек $10 \times 10 \times 1$. Релаксация системы проводилась до разницы по силам $0,01 \text{ эВ/\text{Å}}$ и системы до разницы по полной энергии $0,001 \text{ эВ}$. Энергия отсечки потенциала 250 эВ . 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.

Модель расчетной ячейки

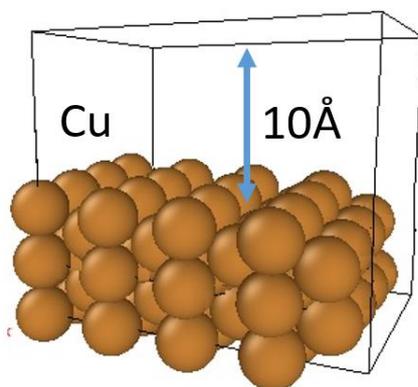


Рис. 11 Суперячейка с периодическими граничными условиями Борна-Кармана

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.

2.8 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. Не известны даже пределы прочности данных структур и их механические характеристики. Поэтому предварительное изучение механических и квантовых свойств различных наноструктур является важным процессом в области нанотехнологий. 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 тонких пленок, изучение упругих характеристик пленок, исследование их квантовых свойств в зависимости от геометрии структуры, а также изучение влияния механических деформаций на квантовые оптические и проводящие свойства тонких пленок. Важной задачей данной работы являлось обнаружение квантового размерного эффекта в зависимости квантовых свойств пленок и одномерных наноструктур от размерных характеристик исследуемых систем.

3. Основные результаты и их обсуждение

3.1 Тонкие металлические пленки

3.1.1 Механические свойства тонких металлических пленок

На первом этапе работы было проведено исследование зависимости механических свойств ультратонких пленок меди от толщины. Для моделирования пленки была построена прямоугольная ячейка, заполненная атомами меди, формирующими N-слойную нанопленку, с «замороженным» нижним слоем атомов (моделирующая металлическую медную пленку, сформированную на поверхности подложки неметаллической природы) или со «свободным» нижним слоем атомов (модель свободно стоящей пленки). В случае модели с «замороженными» атомами, атомы в нижнем слое могут смещаться в плоскости oxy вдоль направления деформации, однако, относительно оси z , перпендикулярной поверхности медной пленки, положение атомов зафиксировано. Данная расчетная модель хорошо описывает свойства осажденных пленок. На Рис.12(а) представлена атомная структура недеформированных медных пленок, пленок с растяжением 10%, соответствующим критическому растяжению, соответствующему моменту появления зародышей деформации во внутренних слоях пленки, то есть началу формирования атомных дислокаций в структуре поверхностного слоя, и с критическим растяжением 20%, соответствующему моменту начала формирования атомного перешейка в структуре пленки, приводящему в итоге к формированию одномерного атомного провода между массивными частями пленки - наноконтакта. На рис.12(б) представлена зависимость продольного напряжения от величины относительной деформации, рассчитанная для пленок различной толщины. Расчеты проводились при $T = 300$ К. В работе обнаружена зависимость упругих характеристик пленок от толщины. Показано изменение характерных областей деформации с увеличением

толщины пленок. Обнаружено, уменьшение модуля Юнга с ростом толщины пленки меди, осажденной на неметаллической подложке, при этом его значения для пленок меди различной толщины (96 ГПа - 100 ГПа) почти в 1.5 раза меньше, чем полученные значения модуля Юнга для кристаллического массива меди 140 ГПа. При этом следует отметить хорошее соответствие значения модуля Юнга для кристаллического массива, полученного в работе, и табличными данными для меди. Величина предельного напряжения при растяжении, соответствующего моменту начала разрушения атомной структуры поверхностного слоя пленки, уменьшается с увеличением количества монослоев (МС). Так пленка, состоящая из 6 МС, начинает разрушаться при значении продольного напряжения 13 ГПа и сохраняет целостность вплоть до критической деформации продольного растяжения $\varepsilon = 0.15$. При этом 16-слойная медная пленка разрушается уже при критическом напряжении 8 ГПа и деформации $\varepsilon = 0.15$.

В результате проведенного исследования на примере пленок меди в работе обнаружено уменьшение эластичности пленок с ростом толщины, и уменьшение прочности пленок.

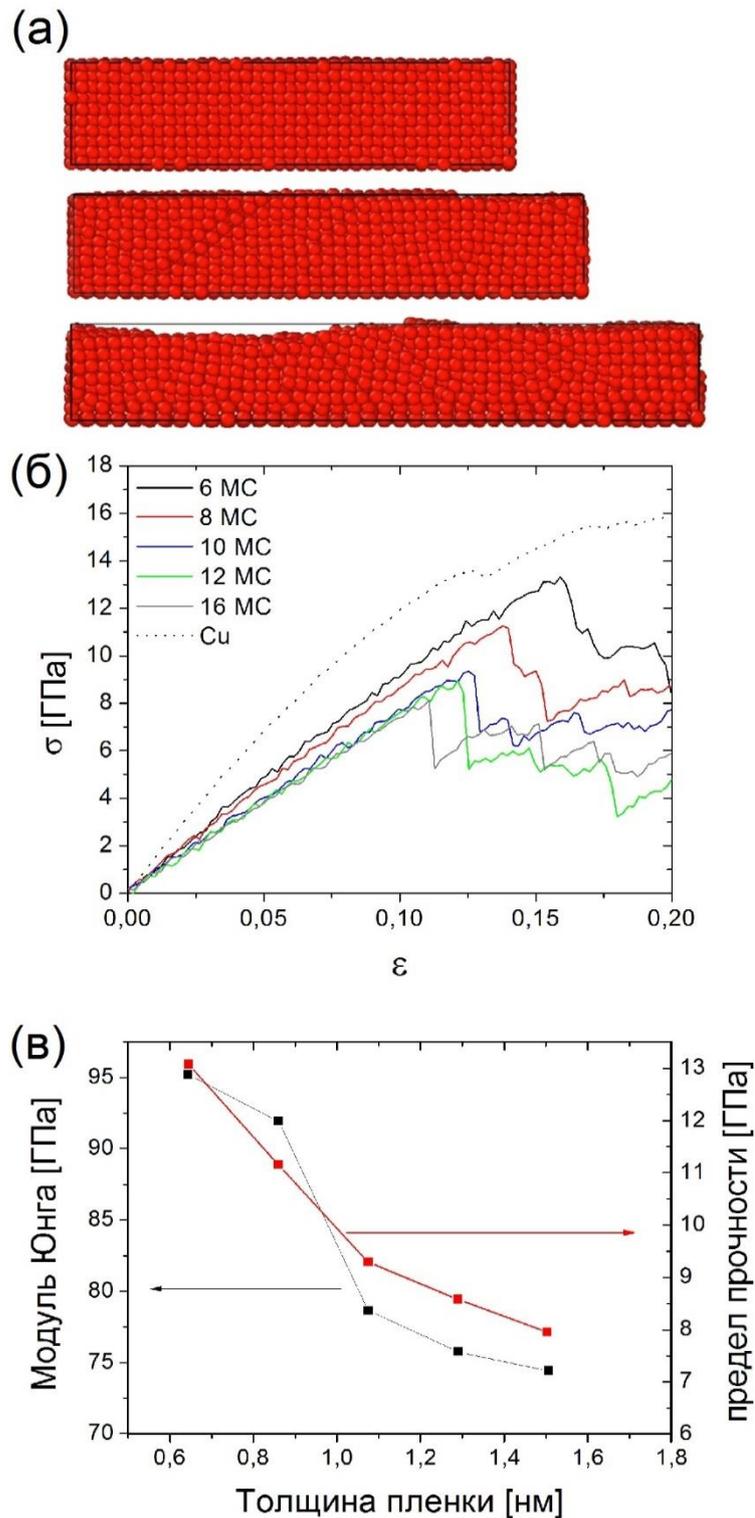


Рис. 12. (а) Модель осажденной медной пленки в равновесном состоянии ($\epsilon = 0$), при относительной продольной деформации $\epsilon = 0.1$, соответствующей критическому напряжению на разрыв, и при $\epsilon = 0.2$, соответствующей началу формирования тонкого перешейка – наноконтакта. (б) Зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ϵ для сформированных на поверхности подложки пленок меди различной толщины при $T = 300$ К. Толщина пленок представлена количеством атомных монослоев (МС). Пунктирной линией показана зависимость для кристаллической меди. (в) Зависимость Модуля Юнга (черная линия) и предельного напряжения на разрыв (предел прочности) (красная линия) пленок меди от толщины.

Кроме этого в работе исследовалось поведение пленок меди при низких температурах и влияние температуры на прочностные и упругие свойства пленок. На рис.13 представлена зависимость продольного напряжения от относительной деформации для сформированных на поверхности подложки пленок меди различной толщины при $T = 10$ К. 6-слойная медная пленка разрывается при значении продольного напряжения 17 ГПа и сохраняет целостность вплоть до деформации $\varepsilon = 0.16$. 16-слойная медная пленка разрушается при продольном напряжении 12 ГПа и деформации $\varepsilon = 0.1$.

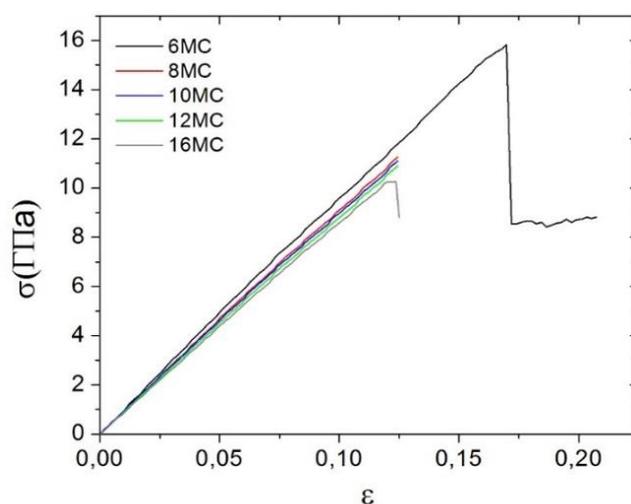


Рис. 13. Зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ε для сформированных на поверхности подложки пленок меди различной толщины при $T = 10$ К.

Было обнаружено, что понижение температуры приводит к росту критических продольных напряжений на разрыв у медных пленок. Было показано, что при низких температурах пленка становится менее хрупкой в отношении продольных деформаций растяжения. В области низких температур модуль Юнга по величине совпадает со значением, рассчитанным для пленок при комнатной температуре $T = 300$ К ($E = 100$ ГПа для 6-слойной пленки).

При численном моделировании упругих свойств свободных сверхтонких пленок меди использовалась расчетная ячейка, в которой пленка

моделировалась несколькими атомными слоями, в которых все атомы свободно смещаются при растяжении пленки вдоль всех трех пространственных направлений x , y , z . Модель пленки, используемая для исследования продольной деформации свободной пленки представлена на Рис.14а. Расчеты показали, что при продольной деформации $\varepsilon = 0.1$ начинается процесс разрушения нижнего и верхнего наружных слоев пленки. При деформации $\varepsilon = 0.2$ в структуре пленки формируется перешеек (наноконтакт), причем у свободной пленки в области перешейка разрушены уже и нижняя, и верхняя поверхности нанопленки.

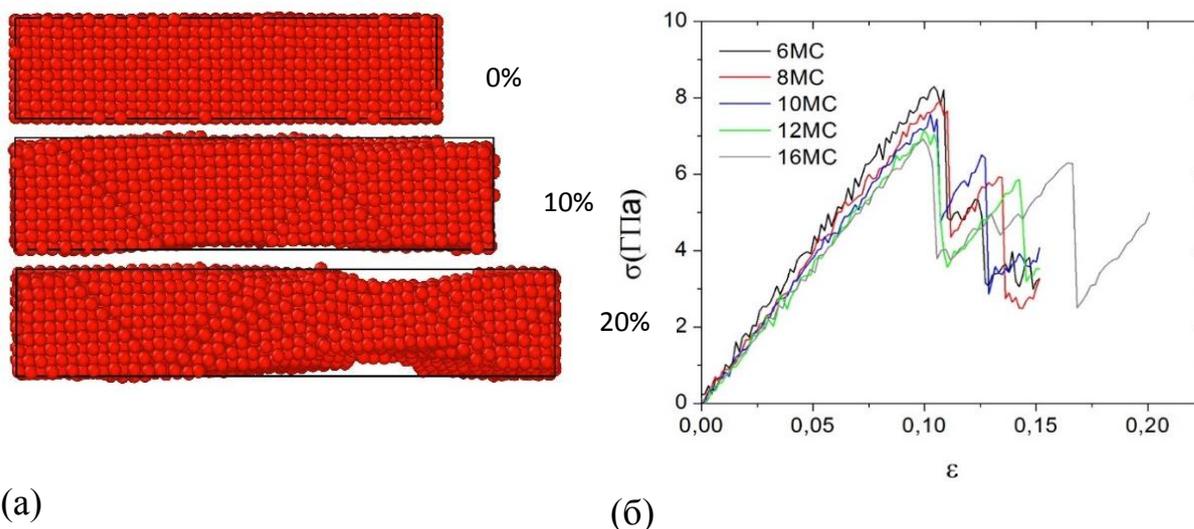


Рис. 14 (а) Модель свободной медной пленки в равновесии ($\varepsilon = 0$), при относительной продольной деформации $\varepsilon = 0.1$, соответствующей критическому напряжению на разрыв, и при $\varepsilon = 0.2$, соответствующей началу формирования тонкого перешейка – наноконтакта. (б) зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ε для свободных пленок меди различной толщины при $T = 300$ К.

Исследование упругих свойств свободных медных пленок при продольном растяжении показали значительное изменение их упругих характеристик в сравнении с пленками, сформированными на поверхности подложки (Рис.12а). На рис.14б представлена зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ε для свободных пленок меди различной толщины

(от 6 до 16 МС) при $T = 300$ К. В случае растяжения свободных пленок не выявляется зависимость упругих характеристик пленки от их толщины. Значения продольного напряжения на разрыв пленки изменяются от 8 ГПа для 6-слойной пленки до 7 ГПа для 16-слойной пленки. Критическая продольная деформация растяжения ε варьируется от ≈ 0.1 до 0.11. Полученное значение модуля Юнга для свободной 6-слойной пленки составило 83 ГПа, что значительно меньше, чем у пленки на поверхности подложки.

Моделирование процессов растяжения тонких свободных в области низких температур, обнаружило слабую зависимость упругих характеристик от толщины пленки. Разрыв свободных пленок в области низких температур не зависел от толщины пленки и происходил при критическом продольном напряжении 8 ГПа и деформации 0.1. Модуль Юнга для свободных пленок составил 85 ГПа.

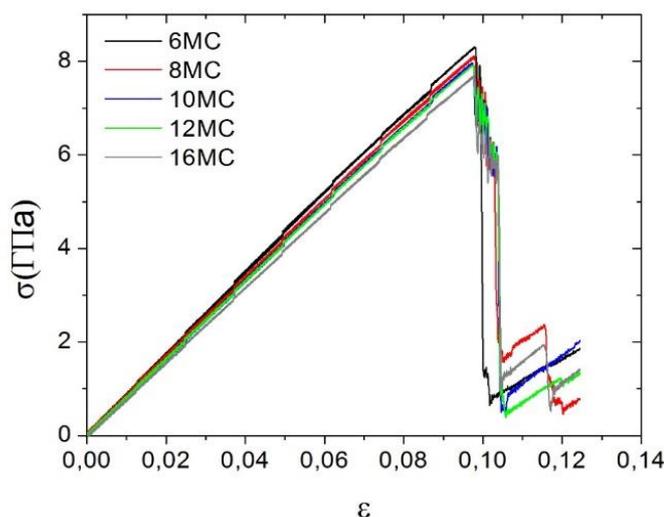


Рис. 15 Зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации для свободных пленок меди различной толщины $T = 10$ К.

При этом и для свободных пленок, и для пленок «построенных» на подложке в зависимости продольного напряжения от величины деформации (рис.12б и 14б) хорошо видны осцилляции продольного напряжения с ростом деформации растяжения. Такая зависимость напряжения от деформации достаточна типична для низкоразмерных систем, объясняется

последовательными перестройками атомной структуры пленки при ее деформации. Осцилляционный характер в зависимости силы от деформации был обнаружен в металлических наноконтактах. Так, периодическое измерение механического напряжения в наноконтактах меди при их деформации наблюдались в работе Субраманьяна [13]. В наноконтактах осцилляции совпадали с перестройками атомной структуры, происходящими в цепи контакта по мере его растяжения и истончения, и полностью исчезали при переходе цепи контакта в одноцепочечную атомную линейную конфигурацию, которая сохранялась неизменной вплоть до полного разрыва цепи наноконтакта. В нашей работе осцилляции продольного напряжения совпадают с появлением в структуре пленок зародышей пластической деформации и с локальным нарушением атомной структуры как в объеме пленки, так и на ее поверхности. При достижении критического продольного напряжения в пленке возникают локальные нарушения атомной структуры, в результате чего в зависимости продольного напряжения появляется область отрицательной упругости. Атомная структура пленки перестраивается таким образом, чтобы обеспечить равновесное состояние с минимальной энергией. В равновесном состоянии перестроенной атомной структуры пленки достигается локальный минимум напряжений. После этого в системе вновь начинают нарастать внутренние механические напряжения. Процесс продолжается до тех пор, пока их величина не достигнет критического уровня, достаточного для создания новых локальных неоднородностей в атомной структуре пленки.

Аналогичные расчеты были проведены для тонких пленок серебра. На рис.16 представлена зависимость продольного напряжения от величины относительной деформации, рассчитанная для пленок различной толщины. Расчеты проводились при $T=300$ К. Критическое напряжение уменьшается с увеличением количества МС, также, как и в пленках меди. Для пленки из 6 МС значение критической деформации $\varepsilon = 0.13$, а критическое напряжение 8 ГПа. При этом для 14-слойной серебряной пленки критическое напряжение 6 ГПа и деформация $\varepsilon = 0.10$. Значение модуля Юнга для 6-слойной пленки равно 69 ГПа.

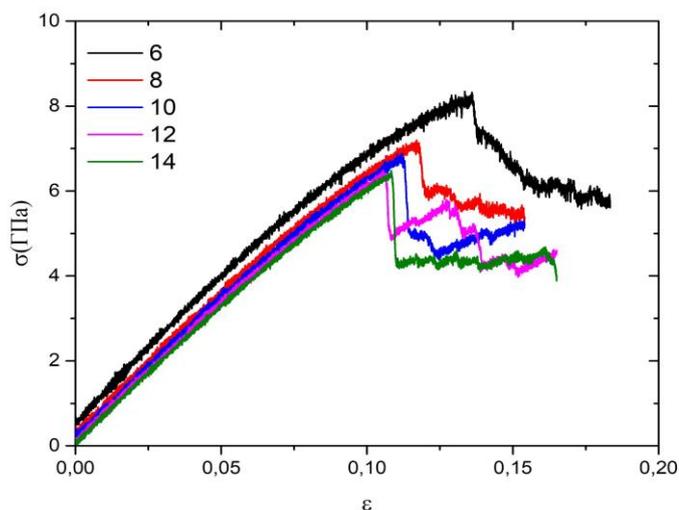


Рис. 16 Зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ε для сформированных на поверхности подложки пленок серебра различной толщины при $T = 300$ К.

Расчеты упругих характеристик были продублированы в области низких температур при $T = 10$ К. На рис.17 представлена зависимость продольного напряжения от относительной деформации для пленок серебра различной толщины, сформированных на поверхности подложки. Вычисления показали, что 6-слойная серебряная пленка разрывается при значении продольного напряжения 12 ГПа и сохраняет целостность вплоть до относительного удлинения $\varepsilon = 0.15$. 14-слойная медная пленка разрушается уже при продольном напряжении 9.5 ГПа и деформации $\varepsilon = 0.125$. Таким образом для пленок серебра, так же как и для пленок меди в работе зафиксирован рост критического напряжения и предельной деформации в области низких температур. Полученное значение модуля Юнга для 6-слойной пленки, сформированной на поверхности подложки при температуре 10К составляет 80Гпа.

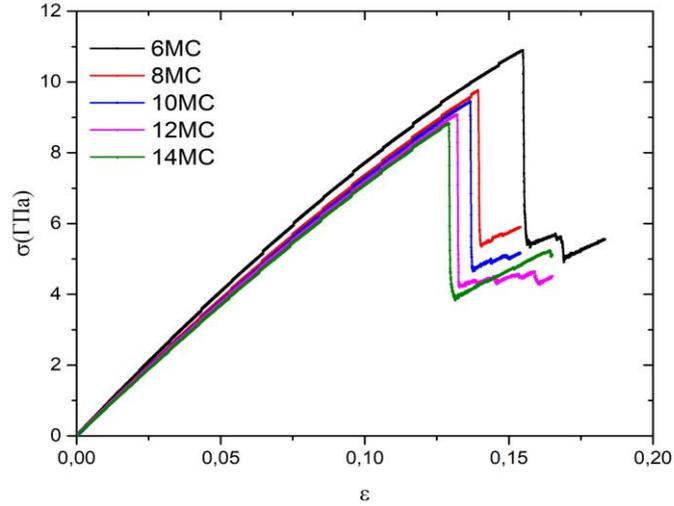


Рис. 17 Зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ε для сформированных на поверхности подложки пленок серебра различной толщины при $T = 10\text{K}$.

Расчеты показали слабую зависимость упругих характеристик пленки от толщины при комнатной температуре для свободных серебряных пленок, зависимость можно увидеть на Рис.18а. Критерии разрыва пленки (критическое продольное напряжение, предельная деформация) в случае свободных пленок от толщины пленки не зависели, как и в случае меди, и разрушение пленок происходило при критическом продольном напряжении 8ГПа и относительной деформации 0.1. Значение $E=58\text{Гпа}$ для 6-слойной пленки.

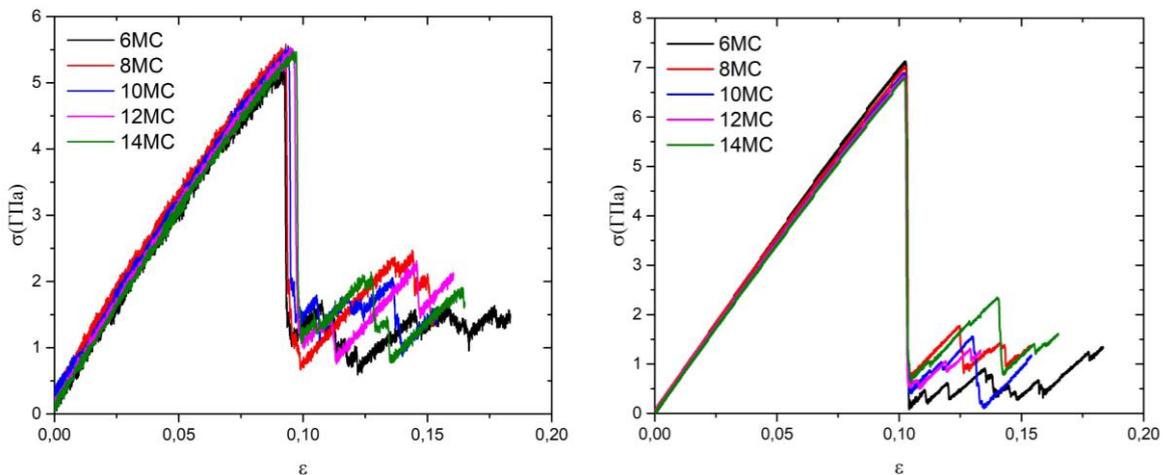


Рис. 18 Зависимость продольного напряжения σ от относительной деформации ε для свободных пленок серебра различной толщины при $T = 300\text{K}$ и при $T=10\text{K}$.

Для свободных серебряных пленок, но уже в области низких температур наблюдается схожая зависимость критических показателей с увеличением размеров пленок. Все пленки разрушаются при относительном удлинении в 0,11 и при критическом напряжении 7,5ГПа. Коэффициент упругости с понижением температуры так же возрастает и его значение равно 73ГПа.

В итоге проведения расчетов методом классической динамики были получены критические значения напряжений и относительных удлинений для двух типов пленок, при разных температурах и условиях формирования пленок.

Изучено влияние толщины на упругие механические характеристики пленок, исследован размерный эффект в зависимости упругих характеристик пленок от толщины и деформации. Кроме этого в работе изучена связь упругих свойств пленок с элементным составом пленки. На примере пленок меди и серебра исследована зависимость упругих и прочностных характеристик пленок от их состава.

3.1.2 Оптические свойства тонких металлических пленок

Следующим этапом работы стало исследование квантовых оптических свойств тонких металлических пленок от толщины с использованием метода теории функционала электронной плотности, реализованного в программном пакете VASP. Были построены зависимости коэффициентов поглощения k и преломления n для пленок меди разной толщины (Рис.19)

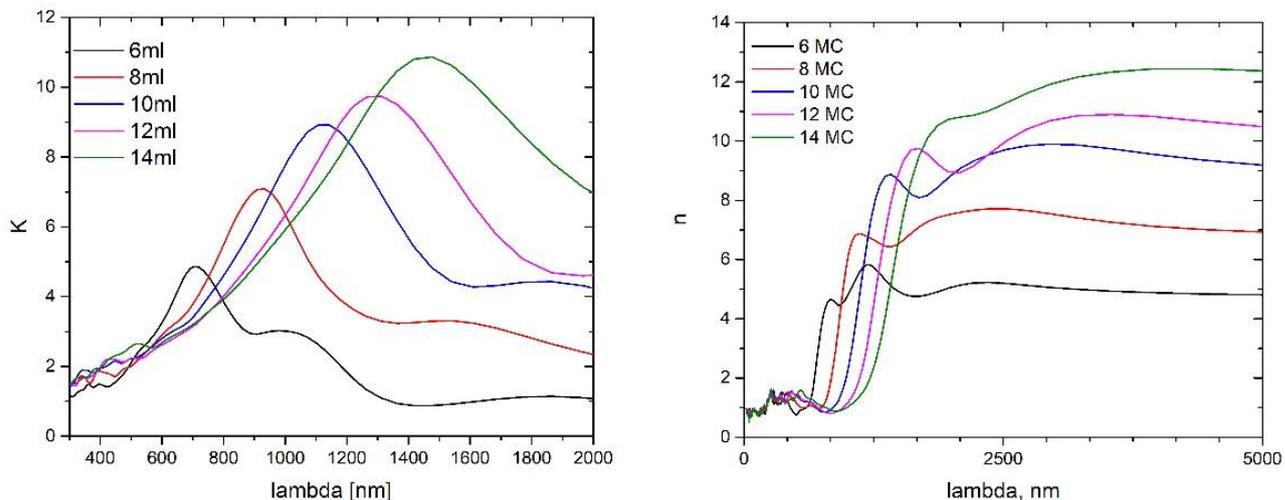


Рис. 19 Зависимости коэффициента поглощения k и коэффициента преломления n от размеров свободных пленок меди

Расчеты показали, что с увеличением толщины пленки происходит смещение коэффициента поглощения в ИК область и его увеличение, так для пленки 6 слоев пиковое значение коэффициента поглощения в два раза меньше, чем для пленки в 14 монослоев. В зависимости коэффициента преломления обнаруживается эффект насыщения с ростом длины волны, причем выход на насыщение происходит на разной длине волны для пленок разной толщины. С увеличением поперечных размеров пленок происходит увеличение значения насыщения коэффициента n .

3.1.3 Влияние деформаций на оптические свойства тонких металлических пленок

В работе также было проведено исследования влияния деформаций на изменение поглощающих свойств пленок. Для изучения влияния продольной деформации на оптические свойства пленок у медных пленок была взята пленка, состоящая из 8 атомных монослоев. Пленки данной толщины

относятся к ультратонким, их свойства в значительной степени носят двумерный характер и отличаются от свойств кристаллического массива меди.

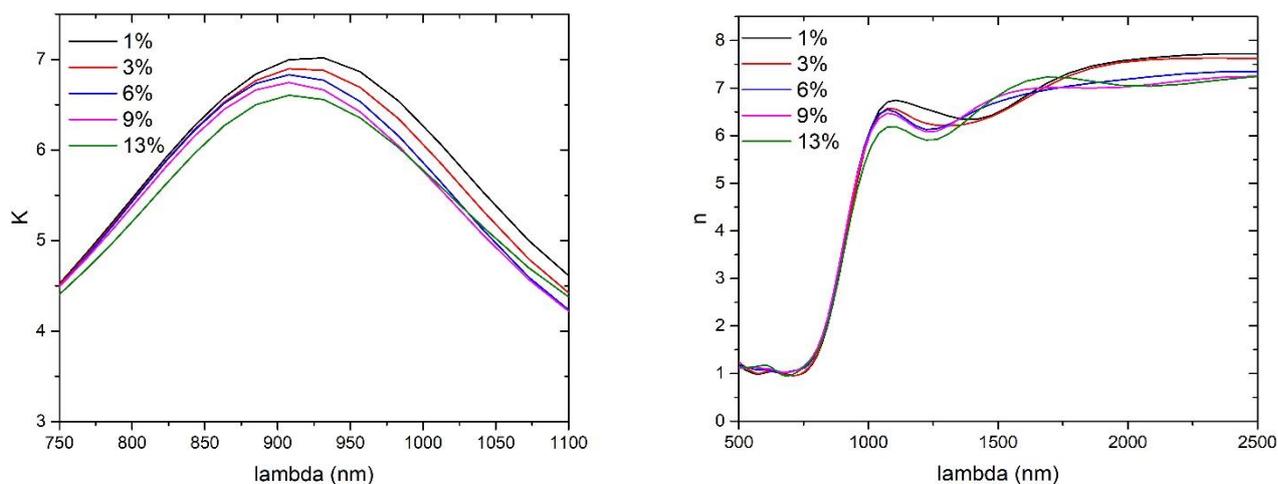


Рис. 20 Зависимости коэффициента поглощения k от длины волны для 8-слойной медной пленки для 1%, 3%, 6%, 9%, 13% продольной деформации и коэффициента преломления n как функция длины волны для 1%, 3%, 6%, 9%, 13% продольной деформации.

На рис. 20 представлены спектры коэффициентов поглощения k и преломления n для деформированной 8-слойной пленки с продольным удлинением 1%, 3%, 6%, 9%, 13% вплоть до критического удлинения, при котором происходит разрушение поверхностной структуры пленки. Исследование показало, что 13% растяжение пленки приводит к изменению спектра поглощения, пик поглощения смещается на 30 нм по сравнению с недеформированной пленкой в УФ область спектра. Пиковое значение k при этом уменьшается.

Аналогичная серия расчетов была проведена для тонких серебряных пленок. В результате было изучено влияние состава пленки на поглощающие свойства, и было проведено сравнение с спектральными закономерностями в пленках меди.

Проведенное исследование обнаружило квантовый размерный эффект в зависимости поглощающих свойств тонких пленок от толщины. Обнаружена трансформация спектров поглощения в пленках с ростом толщины от двумерной структуры спектра в ультратонких пленках до классической структуры спектра поглощения в массиве кристалла (меди и серебра).

3.2 Изучение процессов формирования одномерных наноструктур.

3.2.1 Исследование процесса формирования атомного наноконтакта методом контролируемого разрыва металлической пленки

При исследовании механических свойств тонких деформированных пленок металлов нами было обнаружено формирование стабильных атомных перешейков, атомные характеристики которых уникальны для каждого материала. Так нами был исследован процесс формирования атомных цепочек при деформации пленки меди, золота и платины, изучены критические параметры систем, для каждого материала получено значение относительной деформации и напряжения, при которых происходит переход атомного перешейка в одномерный наноконтакт, и далее в атомную одномерную цепочку.

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.21). Первый этап - толстый контакт с омической проводимостью с сечением в несколько сотен атомов. Второй этап – квазиодномерный наноконтакт 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. [33]. 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.

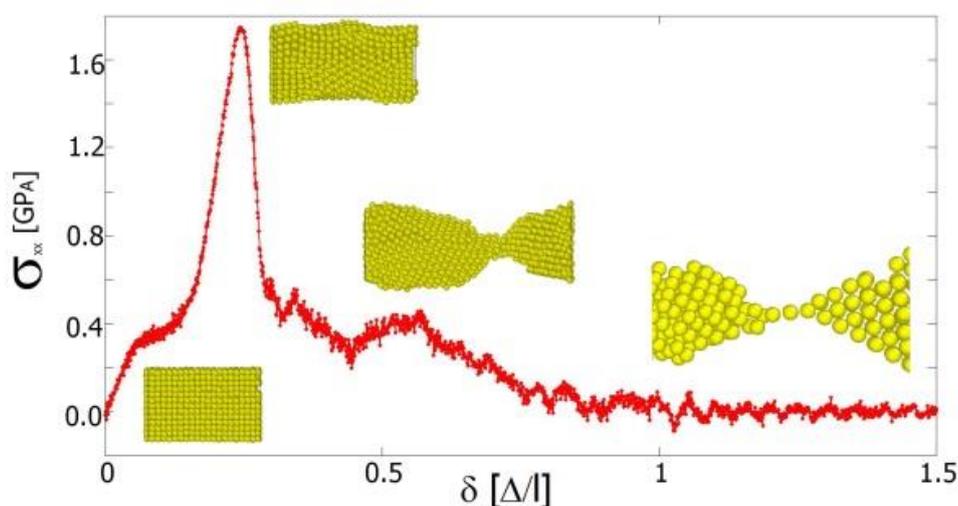


Рис. 21 График зависимости напряжения от удлинения золотого провода со скоростью деформации 10^9c^{-1} .

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

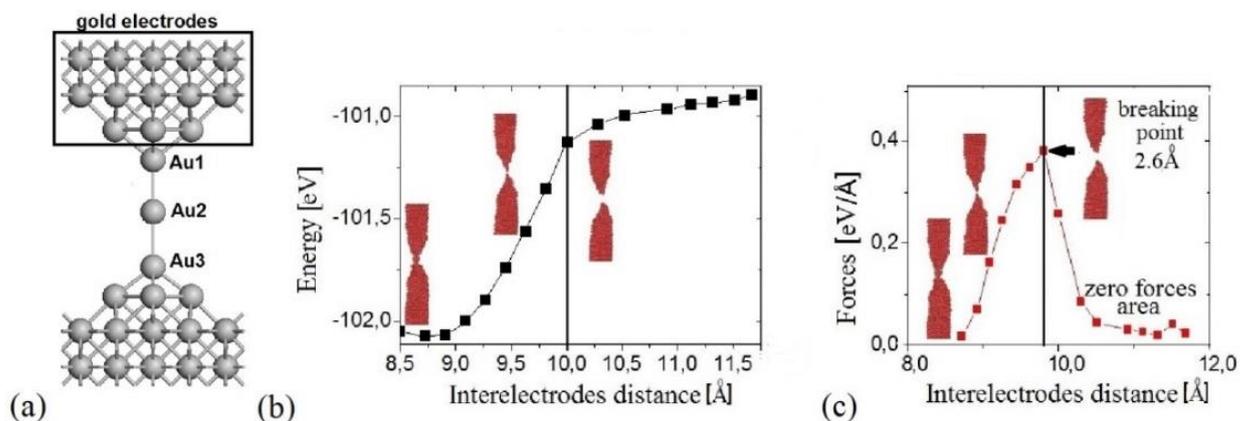


Рис.22 Модель короткого золотого НК для DFT расчета (a), полная энергия золотого НК как функция от межэлектродного расстояния (b), межатомные силы в золотом НК как функция от межэлектродного расстояния (c).

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, $0,4 \text{ эВ/Å}$ (Рис.22). Разрыв контакта соответствует расстоянию между электродами $9,8 \text{ Å}$, что хорошо согласуется с результатами экспериментальных и теоретических работ [34].

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.23). 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 [35].

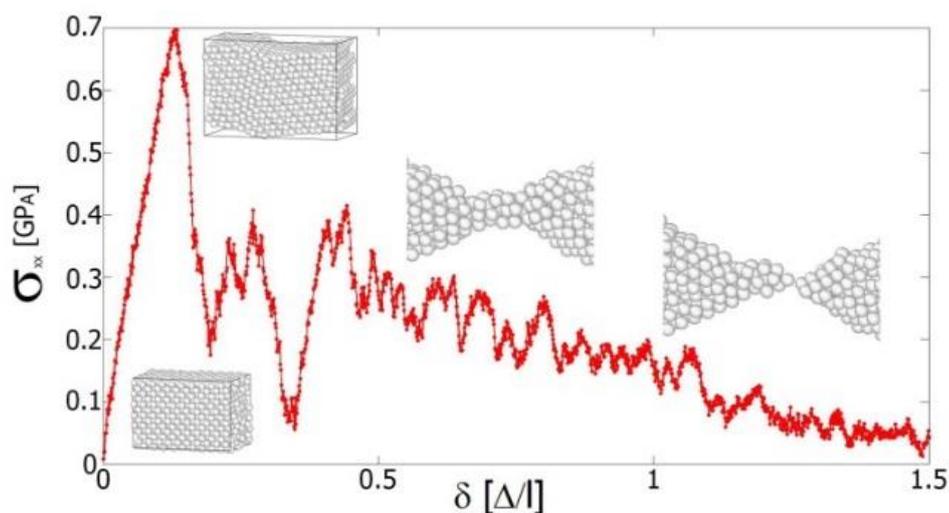


Рис. 23 График зависимости напряжения от удлинения медного провода со скоростью деформации 10^9c^{-1} .

В настоящей работе показано, что при формировании методом контролируемого разрыва в наноконтактах из благородных металлов формируются длинные атомные нити между электродами, что согласуется с результатами ряда экспериментальных и теоретических работ [33,34,35]. Кроме того в рамках проведенного моделирования атомной структуры наноконтактов, полученных при растяжении тонкой пленки металла, показано существование нескольких конфигураций одномерных атомных цепочек, последовательно переходящих друг в друга при «растяжении-сжатия» наноконтакта. Обнаружено существование «зигзаговой» и линейной конфигураций атомных одномерных цепочек, которые отличаются строением электронной и зонной структуры и как следствие квантовыми характеристиками систем.

Кроме того, атомная конфигурация одномерных нанопроводов и атомных цепочек может измениться аналогичным образом при формировании проводов на поверхности подложек. При деформации подложки (поверхности тонкой пленки) за счет изменения межатомных расстояний в системы, изменяется эффективное межатомное взаимодействие в системе «провод-подложка» и как следствие может изменяться атомная структура нанопроводов.

Так моделирование атомных свойств биметаллических Au-Co нанопроводов на поверхности медной подложки (пленки) показало, что при формировании провода на недеформированной подложке атомы меньшего радиуса погружаются в поверхностный слой пленки, в результате чего провод принимает «зигзаговую» конфигурацию. При продольном растяжении пленки, в области упругих деформаций при относительной деформации меньшей 12%, при отсутствии атомных дислокаций на поверхности пленки и сохранении гомогенности атомного строения поверхностного слоя подложки и изотропности атомных связей за счет изменения межатомных расстояний геометрия провода изменяется. Атомы обоих сортов погружаются в поверхностный слой пленки и геометрия провода становится линейной с сопутствующим изменением квантовых свойств провода. Сильное растяжение пленки, приводящее к формированию атомных дислокаций на ее поверхности пленки за счет разрушения поверхностного слоя, приводит к механическому разрушению поверхностных проводов на поверхности пленки.

3.2.2 Изучение процессов формирования и стабильности одномерных нанопроводов на поверхности тонких пленок. Влияние деформаций на стабильность и свойства провода.

И в заключительной части работы с помощью программного кода VASP были изучены атомные свойства Au-Co 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-Co нанопровод был смоделирован в виде 4-х атомной цепочки, расположенный на поверхности Cu(110). Расчеты показали, что направлении [110] является энергетически более выгодным для роста провода на поверхности меди. Кроме того обнаружено изменение конформации провода при растяжении пленки, которые способны изменить свойства провода, в области малых деформаций пленки (подложки).

Расчеты показали, что удлинение подложки в 22% является критическим для Au-Co нанопровода. Происходит разрушение НП при межатомном расстоянии $\sim 3.0\text{\AA}$. 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 результаты и выводы работы.

1. Исследованы зависимости механических свойств ультратонких пленок меди и серебра от их толщины. Рассчитаны критические значения напряжений и относительных удлинений, которые приводят к разрушению поверхностной структуры систем с использованием пакета LAMMPS, в котором реализован метод КМД.
2. Изучены зависимости квантовых оптических свойств тонких металлических пленок от их толщины с использованием метода теории функционала электронной плотности в пакете VASP. Изучены зависимости коэффициентов поглощения k и преломления n от толщины пленок.
3. 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.
4. Исследовано влияние продольного растяжения медной пленки на поверхностный Au-Co нанопровод. Обнаружено изменение конформации провода при растяжении пленки, которые способны изменить свойства провода, в области малых деформаций пленки (подложки).

Список литературы.

1. Parkin S.P., Hayashi M., Thomas L. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*. 2008. Vol. 320. No. 5873, P. 190-194. DOI 10.1126/science.1145799
2. Tsysar K. M., Kolesnikov S. V., Sitnikov I. I., Saletsky A. M., Ab initio investigation of supported Au–Mn nanowires, *Modern Physics Letters B* 2017 Vol. 31, P.1750142. DOI 10.1142/S0217984917501421
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. Boris I. Afinogenov, Vladimir O. Bessonov, Irina V. Soboleva, and Andrey A. Fedyanin, Ultrafast All-Optical Light Control with Tamm Plasmons in Photonic Nanostructures, *ACS Photonics*, 2019, 6 (4), pp 844–850
5. C Zhang, D O Guney and J M Pearce, Plasmonic enhancement of amorphous silicon solar photovoltaic cells with hexagonal silver arrays made with nanosphere lithography, *Mater. Res. Express* 3 (2016) 105034
6. P.Mandal, S.Sharma, Progress in plasmonic solar cell efficiency improvement: A status review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volume 65, November 2016, Pages 537-552
7. Guoping Wang, Xuechen Chen[†], Sheng Liu[‡], Chingping Wong[§], and Sheng Chu, Mechanical Chameleon through Dynamic Real-Time Plasmonic Tuning, *ACS Nano*, 2016, 10 (2), pp 1788–1794,
8. Tsysar Kseniya M., Andreev Valery G., Vdovin Vladimir A., Effective optical constants of silver nanofilms calculated in wide frequency range, , 10224, 1022408-1-1022408-6
9. Hong H., et al. “Alternating Layer and Island Growth of Pb on Si by Spontaneous Quantum Phase Separation” // *Phys. Rev. Lett.* 2003 Vol. 90, P. 076104 doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.076104>
10. Gong J., “Thickness Dispersion of Surface Plasmon of Ag Nano-thin Films: Determination by Ellipsometry Iterated with Transmittance Method” // *Scientific Reports*, 2015, Vol. 5, P. 9279 doi: <https://doi.org/10.1038/srep09279>;
11. Tsysar K.M., Bazhanov D.I., Smelova E.M., Saletsky A.M., “Effect of alloying of magnetic and non-magnetic low reactivity atoms into atomic chain” // *Phys. Status Solidi B* 2014 Vol. 251, P. 871
12. Gladskikh I., Leonov N. B., Przhibel'skiĭ S. G., Vartanyan T.A., // *Journal of Optical Technology*, 2014, Vol. 81 (5), P. 280-284 doi: <https://doi.org/10.1364/JOT.81.000280>

13. Sitnikov I.I., Tsysar K.M., Smelova E.M., Saletsky A.M., “Unusual magnetic properties of Au–Mn nanowires on copper and silicon substrates” // *Physica Status Solidi B* 2017 Vol. 254, P. 1600850; Tsysar K. M., Kolesnikov S. V., Sitnikov I. I., Saletsky A. M., “Ab initio investigation of supported Au–Mn nanowires” // *Modern Physics Letters B* 2017 Vol. 31, P.1750142. doi: 10.1142/S0217984917501421
14. Dryzek J., and Czapla A., “Quantum size effect in optical spectra of thin metallic films” // *Phys. Rev. Lett.*, 1987, Vol. 58, P. 721 doi: DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.721>
15. Apell P., and Ahlqvist P., “Quantum Size Effects on Optical Properties of Thin Films” // *Phys. Scr.*, 1981, Vol. 22, P. 659 doi: <https://doi.org/10.1088/0031-8949/22/6/020>
16. Laref S., et al. “Size-dependent permittivity and intrinsic optical anisotropy of nanometric gold thin films: a density functional theory study” // *Opt. Express*, 2013, Vol. 21, P. 11827 doi: <https://doi.org/10.1364/OE.21.011827>
17. Kuzik L. A., Yakovlev V. A., Pudonin F. A., and Mattei G. “Quantum size effects in the optical conductivity of ultrathin metal films” // *Surf. Sci.* 1996 Vol. 361 P. 882 doi: [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(96\)00556-0](https://doi.org/10.1016/0039-6028(96)00556-0)
18. Kuzik L. A., Yakovlev V. A., Pudonin F. A., “Optical and electrical properties of ultrathin metallic films ” // *JETP* 1994 Vol. 78 P. 114
19. Ming W., Blair S., and Liu F., “Quantum size effect on dielectric function of ultrathin metal film: a first-principles study of Al(1 1 1)” // *J. Phys.: Condens. Matter*, 2014, Vol. 26, P. 505302,
20. Liu M., Han Y., Tang L., Jia J.-F. et al. Interplay between quantum size effect and strain effect on growth of nanoscale metal thin films. *Physical Review B*. 2012. Vol. 86. No.12. P. 125427. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.125427>
21. Rubio G., Agrait N., Vieira S. Atomic-Sized Metallic Contacts: Mechanical Properties and Electronic Transport. *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 76. P. 2302–2305. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.2302>
22. Untiedt C., G. Rubio, Vieira S., Agrait N. Fabrication and characterization of metallic nanowires. *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. P. 2154–2160. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.2154>
23. Subramanian S. K. R. S., Bhethanabotla V. R., Joseph B. Molecular dynamics simulation of temperature and strain rate effects on the elastic properties of bimetallic Pd-Pt nanowires. *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 134117. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.134117>
24. Jaeger Richard C. *Film Deposition // Introduction to Microelectronic Fabrication*. – 2nd. – Upper Saddle River: Prentice Hall, 2002. – 316 p.

25. Sameer Atta, Makki Hiba M. Ali // The Thickness Effects Characterization Properties Of Copper Oxide Thin Films Prepared By Thermal Evaporation Technique. Journal of Multidisciplinary Engineering Science Studies (JMESS) ISSN: 2458-925X Vol. 2 Issue 5, May - 2016
26. S.P. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas, Science 2008, 320, 5873, 190-194
27. H.A. Atwater, "The Promise of Plasmonics" Scientific American, April 2007
28. [Ultra-thin metal films for enhanced solar absorption](#) N Ahmad, J Stokes, NA Fox, M Teng, MJ Cryan Nano Energy 1 (6), 777-782
29. G.E. Norman, V.V. Stegailov, Method of classical molecular dynamics: contribution to the foundations of statistical physics, 141700, p.4-8
30. E. Fermi. Cl.Sci.Fis.Mat.Nat.Rend., 6:602, 1927.
31. А.А. Кацнельсон, В.С. Степанюк, О.Ф. Фарберович, А. Сас. Электронная теория конденсированных сред. М.: Изд-во МГУ, (1990)
32. P. N. Molin, Solid State Storage of Hydrogen in Magnesium Alanate -a Density Functional Study, Department of Physics University of Oslo, (2005).
33. H. Ohnishi, Y. Kondo, K. Takayanagi, Quantized conductance through individual rows of suspended gold atoms, Nature, 395, (1998), p.780-783
34. 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)
35. 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).