

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

КЛАВСЮК АНДРЕЙ ЛЕОНИДОВИЧ

**ПРОЦЕССЫ ФОРМИРОВАНИЯ И
СВОЙСТВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ
ОДНОМЕРНЫХ АТОМНЫХ СТРУКТУР**

Специальность 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва — 2021

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Научный консультант

САЛЕЦКИЙ АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ,
доктор физико-математических наук, профессор.

Официальные оппоненты:

УСПЕНСКИЙ ЮРИЙ АЛЕКСЕЕВИЧ,
доктор физико-математических наук, главный
научный сотрудник, Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки Физический
институт П.Н. Лебедева Российской академии
наук;

ГРАНОВСКИЙ АЛЕКСАНДР БОРИСОВИЧ,
доктор физико-математических наук, профессор,
М. В. Ломоносова, Физический факультет, ка-
федра магнетизма, профессор;

БУШУЕВ ВЛАДИМИР АЛЕКСЕЕВИЧ,
доктор физико-математических наук, профессор,
М. В. Ломоносова, Физический факультет, ка-
федра физики твердого тела, профессор.

Защита состоится 8 апреля 2021 г. в 15 часов 30 минут на заседании диссертационного совета МГУ.01.01 Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова по адресу:

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, МГУ, Физический Факультет

E-mail: laptin@polly.phys.msu.ru

Диссертация находится на хранении в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27). Со сведениями о регистрации участия в защите в удаленном интерактивном режиме и с диссертацией в электронном виде можно ознакомиться, перейдя на страницу диссертационного совета по ссылкам:

https://istina.msu.ru/dissertation_councils; <https://www.msu.ru/science/dis-sov-msu.html>

Автореферат разослан « ____ » февраля 2021 года.

Ученый секретарь

Диссертационного совета МГУ.01.01

кандидат физико-математических наук

Т. В. Лаптинская

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Атомные наноструктуры на поверхности металлов являются перспективным материалом для производителей электронных компонентов, надеющихся использовать их для дальнейшей миниатюризации своей продукции. Считается, что они могут обеспечить очередной технологический прорыв, как в электронике, так и в других отраслях [1—3]. Например, в таких атомных структурах как контакты были обнаружены такие уникальные физические свойства, как квантовая проводимость, баллистическое магнетосопротивление, гигантская магнитная анизотропия. Кроме того, атомные структуры обладают высокой прочностью. Поэтому одной из наиболее актуальных задач на сегодняшний день является получение металлических атомных структур с контролируемыми свойствами.

Под атомными структурами на поверхности металлов подразумеваются одиночные атомы, островки, атомные контакты (атом или цепочка из нескольких атомов, соединяющая два макроскопических электрода) и атомные цепочки (линейные цепочки атомов на поверхности металлов). Почему именно металлические атомные структуры? Если коротко, то атомные металлические структуры имеют несколько аспектов, которые делают их особенно привлекательными. Во-первых, зная свойства атомных структур можно предсказывать свойства более сложных структур и предсказать перспективность того или иного материала для прикладного применения. Во-вторых, большое количество экспериментальных работ, посвященных изучению свойств металлических атомных структур, требуют объяснения.

Исследование свойств атомных структур на поверхности кристаллов является фундаментальной научной проблемой физики конденсированных сред. Одним из инструментов исследования свойств атомных структур является сканирующий туннельный микроскоп. Игла сканирующего туннельного микроскопа часто взаимодействует с исследуемым объектом и изменяет его свойства. Поэтому другой важной фундаментальной за-

дачей современной физики является определение влияния сканирующего туннельного микроскопа на свойства атомных структур.

Бурное развитие физики наноструктур обусловлено не только перспективностью их использования, но и развитием воспроизводимых методов их создания. Для создания большого числа наноструктур на поверхности кристалла в последние годы широко используются эффекты самоорганизации и самоупорядочения при эпитаксиальном росте. Значительный интерес связан с особенностями технологии формирования атомных структур и исследованием влияния параметров технологического процесса на физические свойства получаемых структур. Следовательно исследования в данной области являются актуальными и перспективными. Полученные же зависимости динамики самоорганизации от внешних условий могут быть использованы как в последующих экспериментах по изучению самоорганизации, так и непосредственно в процессе производства массивов нанообъектов с заданными физическими свойствами. В связи с этим еще одной актуальной задачей исследований в настоящее время является описание свойств атомных структур, а также механизмов их формирования при эпитаксии.

Цель и задачи работы. Цель работы теоретическое исследование процессов формирования металлических атомных структур, установление основных диффузионных процессов их формирования, изучение электронных и магнитных свойств. Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Разработка эффективного метода численного моделирования роста атомных структур на поверхности металлов и полупроводников для определения их атомной структуры и их электронных и магнитных свойств..
2. Исследования процессов формирования атомных контактов для установления критериев оценки возможности формирования линейных атомных контактов.
3. Создание сценария эволюции наноконтактов, получаемых в экспе-

рименте методом просвечивающей электронной микроскопии, и определение основных диффузионных событий за эволюцию контакта.

4. Исследование магнитных свойств атомных структур, формирующихся на начальной стадии самоорганизации структур из атомов железа и кобальта в первом слое поверхности Cu(100).
5. Исследование взаимодействия атомов 3d металлов со ступенью на ступенчатой поверхности меди (111).
6. Анализ влияния иглы сканирующего туннельного микроскопа на свойства атомных структур.
7. Установление основных диффузионных процессов формирования атомных цепочек кобальта на ступенчатой поверхности меди и сценария их роста.

Поставленные задачи важны как с фундаментальной, так и с практической точки зрения.

Научная новизна работы. В диссертационной работе впервые установлены механизмы формирования и изучены свойства целого ряда атомных металлических структур.

1. На основе современных теоретических подходов разработана метод, позволяющий численно моделировать процессы самоорганизации атомных структур и исследовать их атомную структуру, электронные и магнитные свойства.
2. Впервые был предложен новый реалистичный подход для моделирования процесса эволюции наноконтактов, получаемых методом просвечивающей электронной микроскопии при комнатной температуре.
3. Впервые было показано различие в процессе формирования атомных контактов методом механически управляемого разрыва и методом просвечивающей электронной микроскопии.

4. Впервые было дано объяснение, почему при низких температурах формирование атомных цепочек кобальта происходит на нижней части ступени, а при комнатной температуре на верхней ее части.
5. Впервые исследовано влияние иглы сканирующего туннельного микроскопа на свойства атомных структур. Впервые показано, что электронные и магнитные свойства атомов $3d$ металлов на поверхности металлов существенно зависят от расстояния между иглой сканирующего туннельного микроскопа и исследуемым объектом.
6. Впервые предложен реалистичный сценарий роста атомных цепочек кобальта на ступенчатой поверхности меди и показано влияние внешних параметров на их длину.

Научная и практическая значимость работы. Поскольку приоритетной задачей диссертационной работы являлось исследование свойств атомных структур, то работа по ее выполнению сводилась к изучению весьма широкого круга структур, формирующихся на поверхности металлов. Исследования по данному направлению физики конденсированного вещества проводятся во многих ведущих лабораториях мира. В Российской Федерации исследованиям свойств атомных структур традиционно уделяется большое внимание, поскольку результаты исследований способствуют созданию новых материалов. Существующие проблемы в области данного исследования связаны как с поиском, так и улучшением параметров новых материалов.

В результате проведения исследования свойств атомных структур были получены сведения об основных закономерностях их формирования, определены их свойства. Результаты исследований электронных и магнитных свойств атомных структур могут быть использованы для создания новых материалов. Кроме того, проведенное в работе исследование механизмов формирования атомных структур на поверхности металлов имеет определяющее значение для процесса производства массивов атомных объектов с заданными физическими свойствами. Результаты исследований также позволят усовершенствовать методы, используемые в сканирующей туннельной микроскопии и будут полезны при интерпретации эксперимен-

тальных данных.

Работа выполнялась при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (гранты 15-32-20560, 12-02-31115, 10-02-01274). Полученные результаты могут представлять практический интерес для научно-исследовательских организаций, занимающихся созданием электронных устройств в частности, МИИТ, МИРЭА, МФТИ, МИЭТ, ИФТТ РАН, ИФП РАН, ИОФАН, ФИАН и др.

Положения, выносимые на защиту.

1. Эффективный метод моделирования эпитаксиального роста атомных структур на поверхности металлов и полупроводников при различных внешних условиях, и исследования их электронных и магнитных свойств.
2. Межатомные расстояния и силы разрыва атомных контактов для группы металлов (Cu, Rh, Pd, Ag, Pt, Au) и их сплавов существенным образом зависят от ориентации границ раздела контакт-поверхность. Отношение энергии связи атомов в одномерной цепочке к энергии связи атомов в кристалле является оценочным параметром возможности формирования линейных атомных контактов: чем больше этот параметр, тем выше вероятность формирования контактов.
3. Микроскопические механизмы диффузии атомов наноконтакта, и формирование атомных контактов при комнатных температурах, сценарий эволюции наноконтактов, имеющих разную кристаллографическую ориентацию.
4. Взаимодействие атомов примеси друг с другом в наноструктурах из атомов железа и кобальта в первом слое поверхности Cu(100) приводит к увеличению спиновых магнитных моментов атомов, уменьшению энергий магнитной анизотропии и орбитальных магнитных моментов. При этом спиновые магнитные моменты погруженных атомов железа примерно в полтора раза больше, чем у атомов кобальта.
5. Взаимодействие атомов 3d металлов со ступенью на нижней и верхней террасах ступенчатой поверхности меди (111) определяется по-

верхностными состояниями и перераспределением заряда на краю ступени, в результате чего наблюдается отличие взаимодействия атомов со ступенькой на нижней и верхней террасе поверхности. Это отличие является причиной того, что при температуре 100 К формирование атомных структур происходит с нижней части ступени, при 300 К на верхней части ступени.

6. Электронные и магнитные свойства атомов 3d металлов на поверхности меди существенно зависят от расстояния между иглой сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) и исследуемым объектом. Температура фазового перехода при взаимодействии с СТМ увеличивается в четыре раза. При этом, взаимодействие атомных структур на поверхности меди с иглой СТМ может приводить как к увеличению, так и к уменьшению энергетических барьеров для диффузионных переходов, происходящих непосредственно под СТМ-иглой.
7. Формирование атомных цепочек кобальта на виниальной поверхности меди осуществляется двумя этапами: случайное блуждание атомов вдоль ступени с барьером, равным 300 мэВ до приближения большинства атомов к краю медной ступени, а затем формирование атомных цепочек на поверхности за счет коалесценции атомов и димеров. При этом, длина цепочек кобальта в основном зависит от ширины террас поверхности, диффузионных барьеров, степени покрытия, потока осаждаемых атомов и температуры.

Степень достоверности и апробация результатов. Результаты, представленные в диссертационной работе, получены с использованием современных методов теоретической физики. Обоснованность и достоверность определяются адекватностью применяемых моделей и сравнением с экспериментальными данными. Достоверность полученных результатов оценивалась по соответствию известных из литературы свойств изучаемых атомных структур. Результаты работы докладывались и обсуждались на российских и международных конференциях по проблемам, связанных с физикой конденсированного состояния.

Основные результаты диссертации были представлены автором лично

на следующих мероприятиях:

- III Международная Балтийская конференция по магнетизму IBCM-2019 (г. Светлогорск, Россия, 2019);
- Международная конференция по нанонауке и технологии ICN+T (Брно, Чехия, 2018);
- 32-я Европейская конференция физики поверхности ECOSS 32 (Гренобль, Франция, 2016);
- 31-я Европейская конференция физики поверхности ECOSS 31 (Барселона, Испания, 2015);
- Объединенный европейский симпозиум по магнетизму JEMS 2013 (Родос, Греция, 2013);
- Международная конференция по теоретической физике Дубна-Нано-2012 (Дубна, Россия, 2012);
- Международная конференция по теоретической физике Дубна-Нано-2010 (Дубна, Россия, 2010);
- 27-я Европейская конференция физики поверхности ECOSS 27 (Гронинген, Нидерланды, 2010);

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 35 статей, включая 12 статей в журналах из списка Топ-25 по импакт-фактору по версии Thomson Reuters, как то Успехи физических наук, Physical Review B, Applied Surface Science и др. Уровень признания полученных в работе результатов может быть оценен также из наукометрических показателей автора, которые на момент представления работы составляют индекс Хирша — 15, число цитирований — 500. Это позволяет считать, что результаты диссертации соответствуют современному мировому уровню исследований в области физики конденсированного состояния и являются обоснованными и достоверными.

Личный вклад автора. Вклад автора в диссертационную работу является определяющим, в том числе в формулировании основных идей предложенных в диссертации теоретических моделей и подходов. Все основные результаты работы получены автором лично, либо при его непосредственном участии. Некоторые из представленных результатов ранее

вошли в кандидатскую диссертационную работу А. Л. Клавсюка «Теоретические исследования физических свойств наноструктур на поверхности меди» под руководством В.С. Степанюка и А.М. Салецкого (защищена в 2008 г. на диссертационном совете Д.501.002.01). Также следует отметить вклад к.ф.м.н. С. В. Колесникова, Е. М. Смеловой, Н. С. Кабанова и А. Г. Сыромятникова (все защитили кандидатские диссертации под руководством А. Л. Клавсюка).

Структура и содержание работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 238 страницах, включает 76 рисунков и 20 таблиц. Общее число ссылок составляет 283. Каждую главу предваряет вступительная часть, представляющая краткое содержание и основные задачи текущей главы. В конце диссертации сформулированы основные результаты, достигнутые в ней.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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

Первая глава посвящена обзору литературы по теме диссертации. В ней проанализированы экспериментальные и теоретические работы, в которых были представлены исследования физических свойств и методов получения таких атомных структур как атомные контакты и атомные цепочки. При этом особое внимание уделено атомным структурам, перспективным с точки зрения их использования в качестве носителей информации. Проведен подробный анализ существующих теоретических моделей, объясняющий формирование атомных структур.

Основным методом моделирования формирования атомных контактов является метод молекулярной динамики, позволяющий использовать в вычислениях ячейки с десятками тысяч атомов. Существенным недостатком этого метода является то, что он позволяет смоделировать эволюцию наноконтакта только в течение десятка фемтосекунд. Однако в эксперименте атомные контакты существуют секунды или даже минуты. Поэтому

необходимо создание методов и далее применение их для моделирования процесса эволюции наноконтактов, получаемых в эксперименте методом просвечивающей электронной микроскопии.

Представленные примеры в первой главе, показывают и другую важную проблему, связанную с тем, что в последнее время появляется много работ, в которых для объяснения экспериментальных данных неправильно применяются теоретические модели. Например, утверждается, что теория функции плотности неправильно описывает свойства атомных цепочек на поверхности металлов. Стоит отметить, что уникальные свойства атомных контактов или цепочек делают их перспективными для практического применения. Так, например, большая магнитная анизотропия делает атомные структуры перспективным материалом для создания магнитных устройств памяти с высокой плотностью записи. Атомные структуры с большой степенью спиновой поляризации могут быть использованы в создании спинового фильтра. А эффект анизотропного магнитосопротивления может использоваться при создании датчиков. Однако практическое применение атомных структур в ряде случаев ограничивается их стабильностью. Поэтому увеличение их времени жизни является одной из целей дальнейших исследований в этой области науки.

Анализ экспериментальных и теоретических данных позволил сформулировать в завершающей части главы постановку задачи: она состоит в исследовании механизмов роста атомных структур и установлению особенностей их атомной и электронной структуры. Для решения этих задач необходимо разработать методику, позволяющую моделировать самоорганизацию системы атомов в процессе самоорганизации и применить ее для исследования их свойства.

Во **второй и третьей главах** представлено описание методов, а именно метода Корринги-Кона-Ростокера (ККР) функций Грина, метода молекулярной динамики (МД), кинетического метода Монте-Карло (КММК). Во второй главе на многочисленных примерах проиллюстрированы трудности применения методов компьютерного моделирования по отдельности. Поэтому делается вывод о необходимости развить методику совместного использования различных методов для решения поставленных в ра-

боте задач. Для описания процессов самоорганизации атомных структур необходимо иметь параметры потенциалов межатомного взаимодействия, которые хорошо описывает взаимодействие атомов, исследуемой системы, задать начальные условия, которые соответствовали бы реальному эксперименту. Далее необходимо отслеживать длительный интервал времени, за который формируются атомные структуры, и иметь представления об их структуре и свойствах. Конечно, при исследовании эволюции системы можно ограничиться методом молекулярной динамики или кинетическим методом Монте-Карло. Однако эти методы моделируют разные временные интервалы. Для их использования необходимо не только задать начальные условия, но и задать потенциал взаимодействия между атомами. Кроме того, теория функционала плотности является мощным инструментом для определения свойств атомных структур. В отличие от других подходов теория функционала плотности использует фундаментальные знания, выраженные в строгой математической формулировке, и не использует подгоночные параметры. Поэтому результаты таких исследований обладают высокой достоверностью. Даже для исследования процессов самоорганизации необходимо использование теории функционала плотности. Поскольку для моделирования необходимо получить параметры потенциалов взаимодействия.

В **четвертой главе** рассматриваются атомные механизмы и условия формирования атомных металлических контактов и их свойства. Показано, что вероятность формирования атомных контактов перед разрывом существенно зависит не только от химического состава, но и от направления, вдоль которого растягивают нанокontakt. Перед разрывом наноконтакта в некоторых случаях образуется атомный контакт в виде цепочки из нескольких атомов. Поэтому немаловажной является информация о том, в каких металлах хорошо формируются атомные контакты, а в каких — нет. Для такой характеристики используются различные параметры. В качестве такого параметра можно использовать отношение энергии связи атомов в одномерной цепочке к энергии связи атомов в кристалле. И тот и другой критерии показывают, насколько связь в одномерных структурах сильнее, чем в идеальном кристалле. Таким образом, чем больше

величина такого оценочного параметра, тем больше вероятность формирования линейных атомных контактов. Правомерность применения этого параметра полностью подтверждается как экспериментально [4], так и с помощью компьютерного моделирования, которое было проведено. Согласно критерию для формирования линейных атомных контактов при низких температурах при разрыве лучше всего подходит палладий, золото и платина, хуже серебро и медь.

Было исследовано формирование биметаллических контактов Co-Au и Ag-Au. Наноконтакты Co-Au и Ag-Au были выбраны, потому что в экспериментальных работах [5—7] было показано их существование и необходимо было теоретически исследовать процесс их формирования. Отношение энергий связи при равномерном перемешивании атомов кобальта и золота составляет 2.1, поэтому следовало ожидать формирования линейных атомных контактов, состоящих как из атомов кобальта, так и атомов золота. Однако расчеты показывают, что при разрыве наноконтактов из сплавов $\text{Co}_{0.25}\text{-Au}_{0.75}$ и $\text{Co}_{0.5}\text{-Au}_{0.5}$ преимущественно формируются линейные контакты из атомов Au. Формирование линейных контактов происходит в тех областях, в которых изначально находилось большое количество атомов Au. Подобное поведение системы обусловлено тем, что энергия связи атомов кобальта с атомами золота больше, чем энергия связи атомов золота друг с другом, поэтому при малых концентрациях атомов кобальта формируются линейные атомные контакты, состоящие только из атомов золота. В случае $\text{Co}_{0.75}\text{-Au}_{0.25}$ атомы Au не формируют больших областей, кроме того концентрация атомов при дальнейшем растягивании только уменьшается.

Анализ результатов моделирования разрыва наноконтакта показал, что перед разрывом формируются в основном три атомные конфигурации. К этим конфигурациям относятся: одноатомные контакты, смешанные тетрамерные контакты и разрыв без формирования атомных контактов. Наиболее вероятный случай — это разрыв без формирования атомных контактов. В серии из 60 моделирований в 41, 45, 43 случаях для направлений [111], [100], [110] соответственно формирования атомных контактов не происходит. Лишь в 19, 15 и 12 случаях для направлений [111], [100],

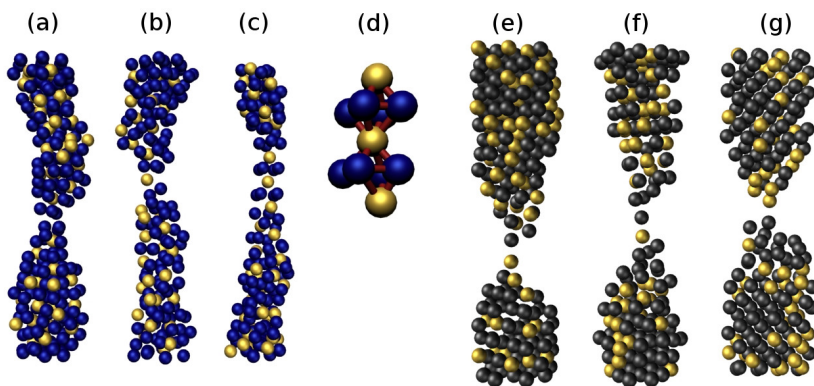


Рис. 1: Атомная структура наноконтакта $\text{Co}_{0.75}\text{-Au}_{0.25}$ при растягивании вдоль разных направлений: (a) вдоль направления $[100]$, (b) вдоль направления $[111]$, (c) вдоль направления $[110]$, (d) увеличенное изображение структуры наноконтакта в области разрыва. Атомная структура наноконтакта $\text{Ag}_{0.75}\text{-Au}_{0.25}$ при растягивании вдоль разных направлений: (f) вдоль направления $[100]$, (g) вдоль направления $[111]$, (e) вдоль направления $[110]$.

$[110]$ соответственно при растягивании наноконтакта формируются одноатомные контакты, представляющие из себя золотой атом, расположенный между двух пирамид (см. рис. 1 (b)). Формирование тетрамерных контактов (см. рис. 1 (c)) является наименее вероятным случаем, и встречается только при растягивании наноконтакта вдоль направления $[110]$. Формирование тетрамерных контактов происходит в 5 случаях из 60 моделирований.

Были рассмотрены наноконтакты Ag-Au . Даже при разрыве $\text{Ag}_{0.75}\text{-Au}_{0.25}$ наноконтакта в области разрыва всегда присутствуют атомы Au в небольшом количестве, о чем так же свидетельствует экспериментальная зависимость проводимости, поведение которой похоже на проводимость чисто золотого контакта в отсутствие примеси [8, 9]. Главная причина этого заключается в том, что сила разрыва для контактов из серебра меньше силы разрыва золотых контактов.

В отличие от Co-Au , Ag-Au с намного большей вероятностью формирует атомные контакты, состоящие из одного, двух и трех атомов. При рас-

тягивании $\text{Ag}_{0.75}\text{-Au}_{0.25}$ наноконтакта в направлениях $[111]$, $[100]$, и $[110]$ в 53, 50, 35 случаях из 60, соответственно, формируются атомные контакты. Некоторые структуры, формирующиеся при разрыве, изображены на рис. 1 (e), (f) и (g). Наиболее типичные конфигурации представляют из себя следующие атомные структуры. Первая из них представляет две пирамиды, одна из которых преимущественно состоит из атомов Ag, другая из атомов Au (см. рис. 1 (e) и (g)). Другая конфигурация представляет также две пирамиды, состоящие из атомов Ag и атома Au расположенного между ними. При уменьшении концентрации атомов серебра вероятность формирования атомных контактов повышается, так как золото лучше формирует атомные контакты, чем серебро.

При формировании контактов из сплавов необходимо учитывать взаимодействие между атомами разных сортов. Поэтому для формирования смешанных линейных контактов необходимо выбирать металлы, энергия связи между атомами которых слабо зависит от сорта атомов.

В четвертой главе описан процесс формирования наноконтакта методом ПЭМ, который условно можно разделить на четыре этапа. На первом этапе тонкий перешеек между двумя отверстиями в пленке золота сразу после их выжигания представляет собой ГЦК кристалл, ограниченный гранями (100), (110) и (111), который, в общем случае, может иметь все возможные ребра между этими гранями. Однако, не все положения атомов в таком кристалле эквивалентны. Наименьшей энергией связи обладают атомы, располагающиеся на ребрах между гранями (110) и (110), (100) и (110), и (100) и (100). Поэтому на первом этапе формирования наноконтакта происходят переход атомов с этих ребер на грани кристалла. В результате, к концу первого этапа формирования поверхность контакта представляет собой совокупность граней (100), (110) и (111), расположенных теперь таким образом, что указанные выше нестабильные ребра отсутствуют.

На втором этапе формирования наноконтакта происходит сокращение площади граней (110), поскольку они являются наименее энергетически выгодными. Этот процесс схематически изображен на рис. 2. Атомы золота имеют высокую подвижность в направлении, параллельном ребру

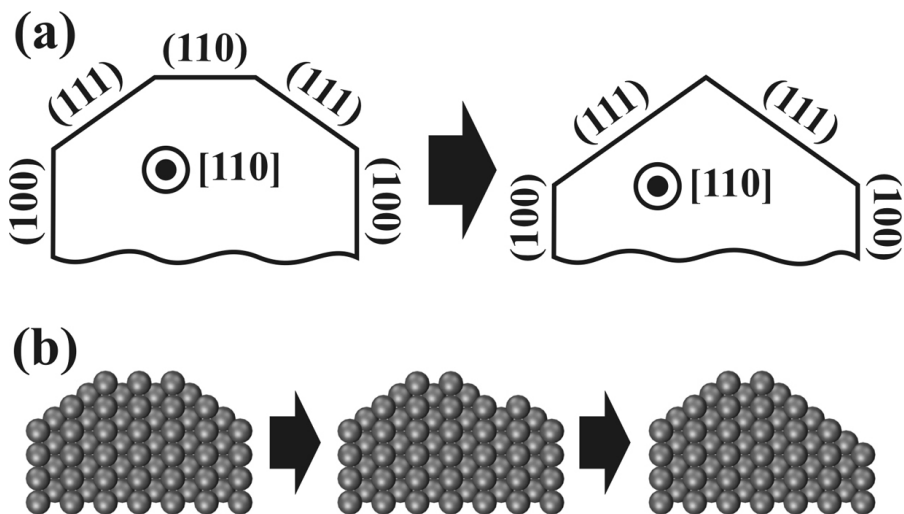


Рис. 2: Схематическое (а) и более детальное (б) изображение части золотого наноконтакта в процессе эволюции. На рисунках показана часть сечения контакта, перпендикулярного направлению $[110]$.

между гранями. Второй этап формирования наноконтакта заканчивается, когда у контакта не остается граней (110) (см. рис. 2). Длительность второго этапа формирования наноконтактов составляет при комнатной температуре время порядка 1 с. Поскольку ребра между гранями (111) и (110), и (111) и (111) в ГЦК кристалле ориентированы в направлении $[110]$, то, если исходный перешеек между отверстиями ориентирован также в направлении $[110]$, то в результате самоорганизации формируется нанопровод, т. е. нанокontakt, однородный по толщине. При любой другой ориентации исходного перешейка формируется контакт в виде двух пирамид с перекрывающимися вершинами. Данный результат, полученный в рамках нашей КММК модели согласуется с экспериментальными данными о наноконтактах, полученными как методом ПЭМ, так и другими методами [10—13].

На третьем этапе формирования наноконтактов происходит постепенное их истончение, связанное с переходом атомов из ребер между гранями (100) и (111) на эти грани. Если грани (100) и (111) не имеют дефектов,

то в рамках нашей модели подобные события оказываются невозможными, т. к. конечное состояние атома неустойчиво, и атом сваливается обратно в свое начальное положение. Поэтому истончение контакта может происходить либо вблизи края контакта, либо в наиболее тонком месте посередине контакта. Однако, поскольку количество атомов, которые могут совершать такие прыжки существенно меньше, чем на втором этапе, длительность третьего этапа формирования наноконтакта оказывается на порядок больше, чем второго, т. е. около одной минуты. Третий этап заканчивается при разрушении кристаллической структуры контакта.

Четвертым этапом формирования наноконтакта можно считать его эволюцию в некристаллической фазе вплоть до формирования одноатомного наноконтакта. Время формирования одноатомного наноконтакта во всяком случае меньше, чем время истончения контакта, имеющего кристаллическую структуру. Действительно, при разрушении кристаллической структуры количество возможных диффузионных событий многократно возрастает. А следовательно, появляются и низкобарьерные события, приводящие к достаточно быстрому формированию одноатомного контакта.

На рис. 3 приведены результаты компьютерного моделирования и изображения экспериментально наблюдаемых наноконтактов [12], полученных методом ПЭМ. Лучше всего результаты моделирования согласуются с экспериментом, если контакт ориентирован вдоль направления $[110]$ (рис. 3 b, g). В этом случае формируются нанопровода, сохраняющие кристаллическую структуру. Если же контакты ориентированы в направлениях $[100]$ (рис. 3 а, f) или $[111]$ (рис. 3 е, h), то формируется атомный контакт между вершинами двух пирамидок. Стоит отметить, что кристаллическая структура контактов, ориентированных в направлении $[100]$ (рис. 3 f), нарушается значительно сильнее, чем структура контактов, ориентированных в направлении $[111]$ (рис. 3 h). Этот результат также хорошо согласуется с экспериментальными данными [12, 13].

Моделирование позволило разделить процесс формирования наноконтакта на четыре основных этапа и выделить основные диффузионные события, отвечающие за самоорганизацию контакта. Тем самым на атом-

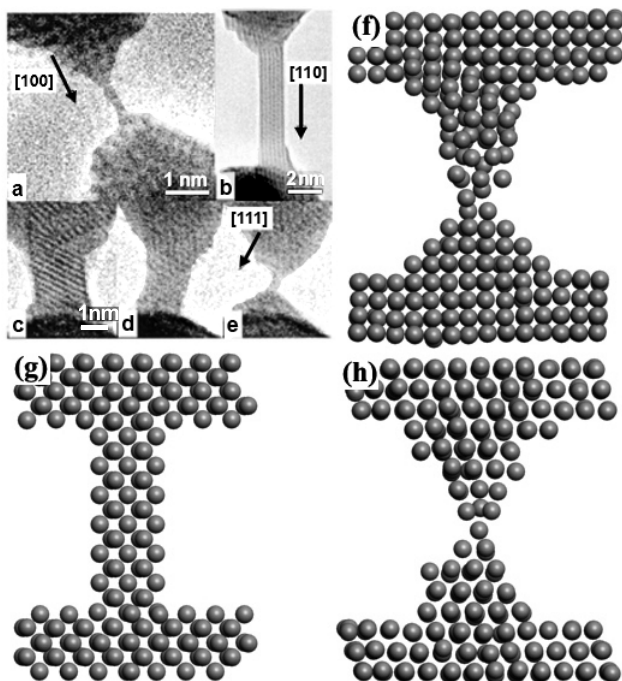


Рис. 3: Формирование золотых наноконтактов, ориентированных вдоль направлений $[100]$ (a,f), $[110]$ (b,g) и $[111]$ (c–e,h). Изображения экспериментально полученных наноконтактов (a–e) взяты из статьи [12].

ном уровне были объяснены причины формирования контактов различной формы при различной их ориентации. Полученная в результате моделирования форма контактов хорошо согласуется с формой наблюдаемых наноконтактов [12, 13]. Кроме того, время формирования наноконтакта при комнатной температуре по порядку величины равно 1 минуте, что также находится в хорошем согласии с экспериментом [12]. Из анализа результатов моделирования формирования наноконтактов методами МД и КММК следует существенное различие между процессами образования контактов при растяжении и при выжигании дырок в тонких пленках. Если при растяжении наноконтактов кристаллическая фаза периодически меняется с некристаллической фазой, то при эволюции тонкого перешейка некристаллическая фаза появляется только на завершающей стадии.

Еще одно характерное отличие заключается в том, что при моделировании методом МД атомные контакты формируются из поверхностных атомов, в то время как при моделировании методом КММК — из внутренних атомов. Эти результаты показывают, что не всегда корректно сопоставлять экспериментальные данные, полученные по отдельности с помощью механически управляемого разрыва и метода ПЭМ.

Среди большого количества методов образования атомных контактов, наиболее простым является механически управляемый разрыв, в котором атомный контакт образуется вследствие разрыва тонкой проволоки. Поэтому на примере наноконтактов без примесей и с примесью были рассмотрены их механические свойства.

Процесс растяжения наноконтактов состоит из эластичной (упругой) фазы, в которой контакт имеет упорядоченную структуру и неэластичной (неупругой) фазы, связанной с образованием неупорядоченной структуры контакта. Ориентация поверхности не влияет на упругие свойства атомного контакта, который формируется перед разрывом. Несмотря на это, значения силы разрыва контакта и межатомного расстояния между крайним атомом и поверхностью сильно различаются. Это связано с разным координационным числом крайнего атома и, как следствие, разной энергией взаимодействия контакта с поверхностью. Например, сила разрыва наноконтакта, расположенного между поверхностями Pd(111) равна 1,87 нН, что почти в три раза больше силы разрыва связи в кристалле 0,57 нН. Анализ структуры атомных контактов выявил две особенности: расстояния между атомами в контакте отличны от расстояний между атомами в идеальном кристалле; распределение длин связей атомных контактов неоднородно. При увеличении числа атомов в контакте распределение длин связей в контакте становится более однородным, а значения близки к значениям бесконечной цепочки атомов.

Изменение структуры и размера атомных контактов приводит к изменению их электронных свойств. В отличие от идеализированного случая, плотность состояний атомов в контакте более размыта по энергии, поскольку контакт имеет конечную длину, и атомы взаимодействуют с электродами. Смещение максимумов плотности состояний обратно пропорци-

онально квадрату длины атомных контактов. Для растянутого атомного контакта взаимодействие между атомами в контакте слабое, и локальная плотность состояний у крайних атомов в контакте близка к плотности состояний атома на поверхности. Изменения плотности состояний указывают на взаимосвязь между электронными и механическими свойствами наноконтактов. Следует отметить, что похожие эффекты характерны и для других одномерных наноструктур. Изменение плотности состояний, связанное с изменением длины контакта, влияет на проводимость через атомные контакты.

В **пятой главе** обсуждаются электронные и магнитные свойства атомов на ступенчатой поверхности металлов. Главным преимуществом использования ступенчатых поверхностей в качестве подложек является тот факт, что на них одномерные упорядоченные структуры формируются вследствие самоорганизации при эпитаксиальном росте [14—17]. Исследование процессов формирования наноструктур на ступенчатых поверхностях является первостепенной задачей на сегодняшний день. Однако моделирование невозможно без детального исследования механизмов взаимодействия атомов на ступенчатых поверхностях.

Зависимость энергии взаимодействия атома никеля с медной ступенью показана на рис. 4. Период осцилляций взаимодействия равен 1.5 нм как для верхней, так и для нижней части ступени. Как видно из рис. 4, атом никеля на расстоянии третьих соседей от ступени испытывает отталкивание. Максимальное значение энергии взаимодействия для нижней части ступени равно 56 мэВ (рис. 4 а), а для верхней части ступени равно 113 мэВ (рис. 4 б). Второй минимум значения энергии взаимодействия для верхней террасы -5 мэВ, что так же меньше чем минимум для нижней террасы -7 мэВ.

Различие в отталкивающих барьерах для атома никеля и других металлов со ступенью может приводить к тому, что при низких температурах атомы будут с большей вероятностью приближаться к ступени с нижней террасы и как следствие формировать там структуры. Для проверки этого утверждения оценим относительные частоты двух событий для двух

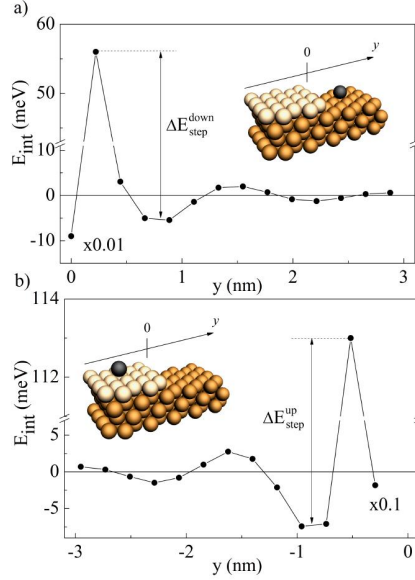


Рис. 4: Энергия взаимодействия атома никеля с ступенью поверхности меди (111) а) на нижней террасе, б) на верхней террасе.

различных температур поверхности (100 К и 300 К) используя формулу

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT}\right), \quad (1)$$

где E_1 , E_2 — отталкивающие барьеры на верхней, нижней террасе, k — постоянная Больцмана, T — температура поверхности. Для отталкивающего барьера $E_2 - E_1 = -55$ мэВ. Относительные частоты равны $\frac{\nu_1}{\nu_2} = 0,002$ при 100 К и $\frac{\nu_1}{\nu_2} = 0,1$ при 300 К. Оценка относительных частот показывает, что при 100 К приближение атома к ступени со стороны верхней террасы практически является редким событием. Отличие взаимодействия атомов со ступенью на нижней и верхней террасе ступенчатой поверхности Cu(111) является причиной того, что при температуре 100 К формирование атомных структур происходит с нижней части ступени, а при 300 К на верхней части ступени.

В пятой главе также рассмотрены магнитные свойства атомов $3d$ ме-

таллов на ступенчатой поверхности меди и серебра. Для этого были рассчитаны магнитные моменты атомов $3d$ металлов на этих поверхностях. На примере атома железа на поверхности меди (001) показано влияние иглы сканирующего туннельного микроскопа на свойства атома.

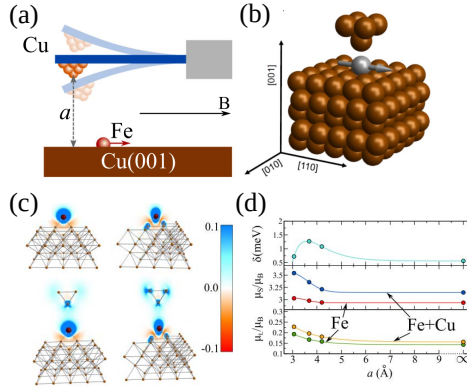


Рис. 5: (а) и (б) Схематичное изображение иглы сканирующего туннельного микроскопа и атома железа на поверхности меди (001). (с) Зарядовая плотность атома для электронов с разной ориентацией спина. Сверху без иглы, снизу игла находится на расстоянии 0,45 нм над атомом железа. (d) Зависимость энергии магнитной анизотропии, спинового магнитного момента и орбитального магнитного момента от расстояния между иглой сканирующего туннельного микроскопа и атомом железа.

Поскольку считается, что на кончике иглы находится один атом, то острие иглы моделируется в виде кластера имеющего вид пирамиды, как это показано на рис. 5. Рассмотрим взаимодействие иглы сканирующего туннельного микроскопа с одиночным атомом примеси на поверхности меди. Когда расстояние между иглой и атомом уменьшается, атом смещается относительно того положения, в котором он бы находился в отсутствие иглы сканирующего туннельного микроскопа. При расстояниях от 0,45 нм до 0,55 нм между иглой и поверхностью атом иглы смещается в направлении поверхности, а атом примеси приподнимается. Смещение атомов примеси достигает 0,1 нм, что впоследствии может привести к значительному увеличению туннельного тока, от которого зависят полу-

чаемые изображения атомных объектов. При расстояниях от 0,35 нм до 0,45 нм между иглой и атомом примеси возникает отталкивание, и расстояние между атомом примеси и поверхностью начинает уменьшаться. Энергетический барьер для прыжка атома к игле при вертикальном приближении иглы к поверхности уменьшается с 550 мэВ до 160 мэВ. Энергетический барьер для прыжка атома от иглы наоборот увеличивается с 550 мэВ до 650 мэВ. При горизонтальном движении иглы к атому кобальта энергетический барьер для прыжка от иглы увеличивается до 800 мэВ и только при приближении к атому начинает уменьшаться. Энергетический барьер для прыжка к игле наоборот уменьшается до 160 мэВ и далее при приближении к атому начинает увеличиваться.

Игла сканирующего туннельного микроскопа влияет на электронные и магнитные свойства одиночных атомов $3d$ металлов, находящихся на поверхности металлов. При расстоянии между иглой и атомом 0,65 нм взаимодействие между ними слабое, и локальная плотность состояний атома похожа на локальную плотность состояний одиночного атома на поверхности. Однако для расстояний 0,50 нм и 0,35 нм взаимодействие между d состояниями атома и s -состояниями крайнего атома иглы и атомами поверхности оказывает влияние на электронные и магнитные состояния атома кобальта. Анализ распределения заряда показывает, что sd -гибридизация уменьшает состояния со спином вверх атома кобальта и увеличивает состояние со спином вниз. В результате чего состояния со спином вверх смещаются к уровню Ферми (в сторону увеличения энергии) и немного уменьшаются, в то время как состояния со спином вниз смещаются к меньшим энергиям. Подобное изменение плотности состояний приводит к изменению проводимости на G_0 . На рис. 5 показано как изменяется зарядовая плотность, спиновый, орбитальный магнитный момент атома и энергия магнитной анизотропии в зависимости от расстояния иглы до атома. Из рисунка 5(с) видно, что игла лишь незначительно увеличивает поляризацию атома железа. Спиновый и орбитальный магнитный момент атома железа увеличивается при приближении к нему иглы (см. рис. 5). Красная и зеленая линия соответствуют значениям при интегрировании спиновой плотности по небольшой сфере только вокруг

атома железа, тогда как синяя и оранжевая линии соответствуют значениям при интегрировании спиновой плотности и по соседним атомам. Энергия магнитной анизотропии сначала увеличивается, а далее уменьшается. Положительный знак энергии магнитной анизотропии означает, что ось легкого намагничивания для одиночного атома железа, находящегося на поверхности меди (100), лежит в плоскости поверхности. Максимальное значение энергии магнитной анизотропии достигается, когда атом железа формирует контакт между иглой и поверхностью.

В начале **шестой главы** предложен сценарий роста атомных цепочек кобальта на ступенчатой поверхности меди, а далее рассматриваются их свойства. При низких температурах необходимо учитывать различие в значении отталкивающего барьера ступени для атома кобальта находящегося на верхней и нижней террасе, обусловленное перераспределением заряда на краю ступени. На чистой поверхности величина отталкивающего барьера для атома кобальта на верхней террасе равна 136 мэВ, а на нижней террасе — 69 мэВ. Если возле ступени уже имеется атомная цепочка кобальта, то значения отталкивающих барьеров равны 227 мэВ и 118 мэВ, соответственно.

Сценарий роста следующий. После напыления атомы случайно блуждают по террасе, преодолевая энергетический барьер 30–40 мэВ. Если скорость напыления мала, то до напыления следующего атома атом кобальта успевает подойти к краю ступени. Отталкивающий барьер ступени для атома кобальта на верхней террасе выше, чем на нижней. По этой причине при температурах в диапазоне 150–170 К атомы кобальта окажутся возле ступени с нижней стороны террасы. Лишь 2–3 атома из тысячи подойдут к краю ступени с верхней террасы. В дальнейшем они могут внедряться в край ступени посредством обменного механизма на краю ступени [18] или перепрыгнуть на нижнюю террасу, преодолев барьер Эрлиха-Швобеля, равный 250 мэВ. Диффузионный барьер для того, чтобы атом кобальта отпрыгнул от медной ступени равен 800 мэВ, следовательно, вероятность этого события очень мала. Поэтому атомы кобальта далее будут двигаться вдоль ступени случайным образом с барьером, равным 300 мэВ. Первый этап заканчивается, когда большинство

атомов кобальта подойдут к краю медной ступени.

На втором этапе продолжается формирование атомных цепочек на ступенчатой поверхности за счёт коалесценции возле ступени атомов и димеров. Дефекты ступени или димеры, сформировавшиеся при встрече двух атомов кобальта, становятся центром роста атомной цепочки. Вероятность формирования димера уменьшается с ростом ширины ступени и температуры. Количество центров роста зависит от качества подготовки образцов, температуры и значения диффузионного барьера одиночного атома, скорости напыления, степени покрытия [19, 20]. Результаты моделирования показывают, что длина атомных цепочек кобальта в основном зависит от ширин террас поверхности, диффузионных барьеров и экспериментальных параметров, таких как степень покрытия, поток осаждаемых атомов, температура.

Экспериментальное значение энергии связи определяется по данным, полученным из распределения длин цепочек [21, 22]. Однако, экспериментальные значения энергии связи существенно отличаются от рассчитанных теоретически. Одной из главных проблем при ее определении является тот факт, что распределения, получаемые в эксперименте, получены при низких температурах, в то время как сами одномерные островки формируются при отжиге. Например, острова Ag растут при 400 К, хотя их СТМ изображения были получены при 77 К [21, 22]. Поэтому необходимо принимать в расчет также и процесс охлаждения. Для простоты предположим, что в реальном эксперименте температура изменяется, подчиняясь следующему закону

$$T(t) = T_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\text{cool}}}\right), \quad (2)$$

где T_0 — начальная температура, а τ_{cool} — время релаксации. Тогда время охлаждения Δt , за которое температура образца изменится с T до $T + \Delta T$ выражается как

$$\Delta t = \tau_{\text{cool}} \frac{\Delta T}{T(t)}. \quad (3)$$

Если время охлаждения Δt существенно короче, чем время жизни ко-

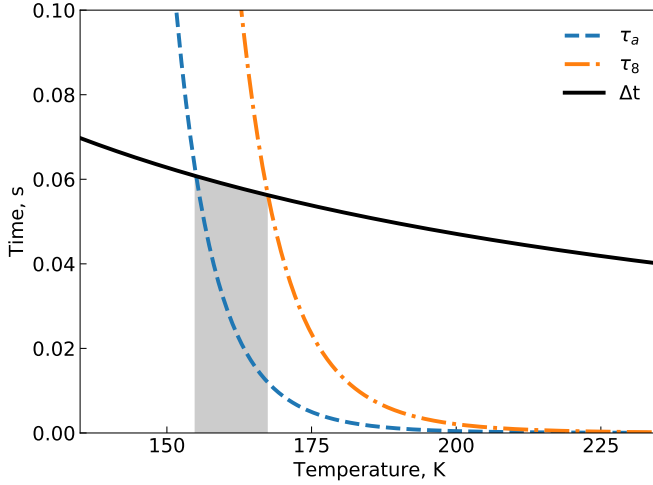


Рис. 6: Время охлаждения Δt , характеристическое время τ_a и время жизни одномерного островка, состоящего из 8 атомов, τ_8 как функция температуры.

ротких цепочек, то распределение будет равновесным. В противном случае оно будет неравновесным, так как система не успеет достигнуть состояния термодинамического равновесия. Для Ag/Pt(997) оценки показывают, что невозможно получить равновесное распределение длин цепочек при температурах менее 165 K (см. рис. 6). Поэтому именно это значение критической температуры необходимо использовать при расчетах энергии связи.

Учитывая вышесказанное, энергию связи в случае одномерных структур необходимо определять следующим образом.

- Получить экспериментальное распределение длин одномерных структур.
- Определить критическую температуру. Критической называется та температура, при которой размер одномерных структур остается постоянным при неизменных параметрах эксперимента. Например, в работе [23] была определена критическая температура для роста двумерных островов.

- Аппроксимировать экспериментальное распределение неравновесным распределением

$$f(l, t) = \begin{cases} A' \frac{K}{M} \exp\left(-\frac{t}{\tau_w}\right), & l = 1 \\ A' \frac{K}{M} \left(1 - \frac{K}{M}\right) \exp\left(-\frac{t}{\tau_a}\right), & l = 2 \\ A' \frac{K}{M} \left(1 - \frac{K}{M}\right)^{l-1} \exp\left(-\frac{t}{\tau_a l(l-2)}\right), & l \geq 3 \end{cases} \quad (4)$$

и определить параметр K . Здесь M — количество атомов примеси, K — число цепочек, A' — нормировочный коэффициент, τ_a — время блуждания атома от одной цепочки к другой, τ_w — среднее время случайного блуждания атома между цепочками

- Определить значение энергии связи с помощью формулы

$$\epsilon = k_B T \ln \frac{(M - K)(N - M - K)}{K^2}, \quad (5)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — температура подложки, N — N количество узлов.

Экспериментальное значение энергии связи, рассчитанное по алгоритму, описанному выше, равно 0,047 эВ для Ag/Pt(997), в то время как расчеты в рамках теории функционала плотности дают значение 0,060 эВ. Различие в приведенных значениях может быть вызвано относительной простотой закона (2), определяющего процесс охлаждения образца.

Структура коротких атомных цепочек кобальта, расположенных возле ступени поверхности меди (111), будет отличаться от структуры длинных атомных цепочек кобальта. Это связано с тем фактом, что атомы кобальта на краях цепочек более свободные и, как следствие, взаимодействия с атомами кобальта и атомов меди ступени могут значительно изменяться. Атомная цепочка кобальта имеет сложную форму, похожую на букву “М”. Крайние атомы вместе с центральным атомом смещаются вниз, все остальные атомы смещаются вверх. Атомы поверхности меди под атомной цепочкой также смещаются вниз. Вертикальные смещения атомов кобальта в цепочке сильно зависят от ее длины. С увеличением длины

цепочки, влияние крайних атомов становится меньше.

Для длинных атомных цепочек кобальта было экспериментально [24] обнаружено, что при низких температурах (меньше чем 100 К) расстояние между атомом кобальта и его двумя ближайшими соседями равно 0,20 нм и 0,31 нм. Другими словами, атомная цепочка “димеризуется”. Установлено также, что чем больше разность потенциалов между иглой сканирующего туннельного микроскопа и поверхностью, тем выше температура при которой наблюдается димеризация атомной цепочки. Димеризация атомной цепочки кобальта наблюдалась при расстоянии между иглой СТМ и цепочкой больше чем 0,5 нм [24]. Если расстояние между иглой и атомной цепочкой достаточно мало, то вблизи иглы СТМ под действием электрического поля будет возникать существенная деформация цепочки. При сканировании иглой вдоль атомной цепочки, постоянно меняется область деформации, и невозможно определить с большой точностью расстояния между атомами, поскольку СТМ изображения размыты. При увеличении расстояния между цепочкой и СТМ влияние мини-острия становится несущественным, в этом случае область деформации будет иметь размер не несколько атомов, а несколько нанометров [25]. Радиус кривизны СТМ-иглы равен 2–30 нм, что соизмеримо со средней длиной рассматриваемых цепочек. Поэтому СТМ-игла будет изменять свойства целой цепочки при взаимодействии с ней. Если исключить влияние мини-острия, то явление димеризации атомных цепочек кобальта зависит только от разности потенциалов между иглой и цепочкой [25]. Расчеты показывают, что энергия димеризации цепочки при взаимодействии с иглой СТМ изменяется с 2 мэВ до 18 мэВ.

Межатомные расстояния в димеризованной цепочке равны 0,23 нм и 0,28 нм. Подобное поведение характерно и для других ступенчатых поверхностей меди (111). Однако энергия димеризации цепочки кобальта на поверхности меди (775) без влияния СТМ-иглы значительно выше (6 мэВ), чем на поверхности меди (111) (2 мэВ). Межатомные расстояния в димерах для меди (775) и меди (111) равны 0,23 нм и 0,24 нм соответственно. Во всех перечисленных случаях ступенчатая поверхность состоит из небольших террас и атомные цепочки Co, расположенные воз-

ле соседних ступеней, взаимодействуют друг с другом. Таким образом, энергия димеризации цепочек зависит и от ширины террас поверхности.

При температуре близкой к нулю все атомы цепочки образуют димеры. При увеличении температуры симметрия цепочки нарушается, и выше критической температуры вероятность обнаружить димеры стремится к нулю. Подобное поведение характерно для фазового перехода второго рода. При увеличении длины цепочки температура фазового перехода уменьшается. Температура фазового перехода при взаимодействии с СТМ увеличивается в четыре раза и существенно зависит от длины атомной цепочки. Кроме того, энергия димеризации цепочек кобальта зависит и от ширины террас поверхности.

В последнее время появляется интерес к созданию и исследованию магнитных наноструктур в первом слое поверхности парамагнитной подложки, поскольку погруженные наноструктуры обладают большей стабильностью, чем наноструктуры на поверхности. Магнитные свойства атомных структур, формирующихся на начальной стадии самоорганизации наноструктур из атомов железа и кобальта в первом слое поверхности меди (100) были подробно рассмотрены. Некомпактные наноструктуры имеют большую ЭМА, чем компактные. Это связано с тем, что взаимодействие между атомами примеси (Co-Co или Fe-Fe) уменьшает ЭМА отдельных атомов. В результате крайние атомы, имеющие меньшее число ближайших соседей, дают больший вклад в среднюю ЭМА, чем средние атомы [26, 27]. Если оси легкого намагничивания малых кластеров кобальта лежат в плоскости поверхности (100), то оси легкого намагничивания всех погруженных наноструктур (за исключением одиночного атома) из атомов железа перпендикулярны поверхности. Спиновый магнитный момент атомов железа примерно в полтора раза больше, чем у атомов кобальта, причем спиновые моменты атомов связанных наноструктур оказываются несколько больше, чем у адатомов. Увеличение спинового магнитного момента связанных наноструктур происходит вследствие уширения плотности d -состояний из-за взаимодействия атомов примеси друг с другом. В отличие от спинового магнитного момента, анизотропия орбитального магнитного момента достаточно велика. Это связано с тем, что для пере-

ходных металлов с d -подоболочкой заполненной больше, чем наполовину, проекция орбитального момента на ось легкого намагничивания, как правило, оказывается максимальной [28]. Также как и ЭМА, орбитальный магнитный момент атомов примеси уменьшается за счёт взаимодействия атомов примеси друг с другом.

В диссертации представлены и результаты исследования магнитных свойств атомных цепочек $3d$ металлов на поверхности меди и серебра (111) и (775). Размещение магнитных проводов на поверхности является причиной поляризации плотности состояний. Анализ спинполяризованной плотности состояний показывает, что состояния со спином вверх не изменяются при размещении на поверхности провода, в то время как состояния со спином вниз смещаются по энергии. Поэтому локализованные состояния исчезают в спектре проводимости, измеренном неспинполяризованным СТМ.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан метод численного моделирования эпитаксиального роста атомных структур на поверхности металлов и полупроводников, их структурной организации, электронных и магнитных свойств при различных внешних условиях.
2. В результате исследования процессов формирования атомных контактов показано, что для группы металлов (Cu, Rh, Pd, Ag, Pt, Au) и их сплавов межатомные расстояния и силы разрыва атомных контактов существенным образом зависят от ориентации ((100), (110) или (111)) границ раздела контакт - поверхность. На основе отношения энергий связи атомов в одномерной цепочке и в кристалле, предложен надежный и простой способ оценки возможности формирования линейных атомных контактов: чем больше этот параметр, тем выше вероятность формирования контактов.
3. Предложен новый достаточно простой, но точный подход для описания процессов формирования наноконтактов методом просвечивающей электронной микроскопии. Использование данного подхода

позволило разделить процесс формирования наноконтакта на четыре основных этапа и выделить основные диффузионные события, отвечающие за эволюцию контакта и объяснены причины формирования контактов различной формы при разной их ориентации.

4. В наноструктурах из атомов железа и кобальта в первом слое поверхности $\text{Cu}(100)$ энергия магнитной анизотропии у атомов кобальта на два порядка больше, чем у атомов железа. Спиновые магнитные моменты погруженных атомов железа примерно в полтора раза больше, а орбитальные магнитные моменты в несколько раз меньше, чем у атомов кобальта. Взаимодействие атомов примеси друг с другом приводит к увеличению спиновых магнитных моментов атомов, уменьшению энергии магнитной анизотропии и орбитальных магнитных моментов.
5. Установлено отличие взаимодействия атомов 3d металлов со ступенью на нижней и верхней террасах ступенчатой поверхности меди (111), которое обусловлено поверхностными состояниями и перераспределением заряда на краю ступени. Полученные результаты объясняют, почему в эксперименте при низких температурах формирование наноструктур происходит на нижней части ступени, а при комнатной температуре — на верхней ее части.
6. Изучено взаимодействие атомных структур на поверхности меди с иглой сканирующего туннельного микроскопа. Обнаружено, что это взаимодействие может приводить как к увеличению, так и к уменьшению энергетических барьеров для диффузионных переходов, происходящих непосредственно под СТМ-иглой. Показано, что электронные и магнитные свойства атомов 3d металлов на поверхности меди существенно зависят от расстояния между иглой сканирующего туннельного микроскопа и исследуемым объектом. Установлено, что температура фазового перехода при взаимодействии с СТМ увеличивается в четыре раза.
7. Установлены основные диффузионные процессы, отвечающие за фор-

мирование атомных цепочек кобальта на ступенчатой поверхности меди: на первом этапе случайное блуждание атомов вдоль ступени, а затем формирование атомных цепочек на поверхности за счет коалесценции атомов и димеров. Показано, что длина цепочек кобальта в основном зависит от ширины террас поверхности, диффузионных барьеров, степени покрытия, потока осаждаемых атомов и температуры.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science и SCOPUS

1. Клавсюк, А. Л., Салецкий, А. М. Формирование и свойства металлических атомных контактов. *Успехи физических наук* **185**, 1009—1030 (2015). IF = 2.126 (Web of Science).
2. Колесников, С. В., Салецкий, А. М., Докукин, С. А., Клавсюк, А. Л. Кинетический метод Монте-Карло: математические основы и приложения к физике низкоразмерных наноструктур. *Математическое моделирование* **30**, 48—80 (2018). IF = 0.988 (Web of Science).
3. Колесников, С. В., Клавсюк, А. Л., Салецкий, А. М. Формирование двухслойных островов Co на поверхности Cu(100). *Физика твердого тела* **51**, 1183—1187 (2009). IF = 1.143 (Web of Science).
4. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. The role of the diffusion of dimers in the formation of Co nanostructures embedded into Cu(100) surface. *The European Physical Journal B* **86**, 399 (1–6) (2013). IF = 1.565 (Web of Science).
5. Dokukin, S. A., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Growth of the Pt/Cu(111) surface alloy: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations. *Journal of Alloys and Compounds* **763**, 719–727 (2018). IF = 4.650 (Web of Science).

6. Dokukin, S. A., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Diffusion-mediated processes in Pt/Cu(001) surface alloy. *Surface Science* **692**, 121515 (1–8) (2020). IF = 1.466 (Web of Science).
7. Kap, Ö., Kabanov, N., Tsvetanova, M., Varlikli, C., Klavsyuk, A. L., Zandvliet, H. J. W., Sotthewes, K. Structural Stability of Physisorbed Air-Oxidized Decanethiols on Au(111). *The Journal of Physical Chemistry C* **124**, 11977–11984 (2020). IF = 4.189 (Web of Science).
8. Клавсюк, А. Л., Колесников, С. В., Смелова, Е. М., Салецкий, А. М. Исследование механических свойств палладиевых наноконтактов методом молекулярной динамики. *Письма в ЖЭТФ* **91**, 169–172 (2010). IF = 1.805 (Web of Science).
9. Клавсюк, А. Л., Колесников, С. В., Смелова, Е. М., Салецкий, А. Моделирование процесса формирования металлических наноконтактов методом молекулярной динамики. *Физика твердого тела* **53**, 2237–2241 (2011). IF = 1.144 (Web of Science).
10. Клавсюк, А. Л., Колесников, С. В., Гайнуллин, И. К., Салецкий, А. М. Исследование взаимодействия палладиевого наноконтакта с молекулой водорода. *Письма в ЖЭТФ* **93**, 588–591 (2011). IF = 1.754 (Web of Science).
11. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Gainullin, I. K., Saletsky, A. M. Molecular dynamics study of Co-Au and Ag-Au bimetallic atomic chain formation. *The European Physical Journal B* **85**, 331 (1–5) (2012). IF = 1.403 (Web of Science).
12. Смелова, Е. М., Клавсюк, А. Л., Цысарь, К. М., Салецкий, А. М. Исследование механических и электронных свойств Ag-Au и Co-Au наноконтактов методом первопринципной молекулярной динамики. *Вестник Московского Университета Серия 3. Физика. Астрономия* **1**, 88–91 (2013). IF = 0.405 (Web of Science).
13. Колесников, С. В., Клавсюк, А. Л., Салецкий, А. М. Моделирование самоорганизации наноконтактов в тонких пленках золота. *Физика твердого тела* **55**, 1834–1838 (2013). IF = 1.331 (Web of Science).

14. Kolesnikov, S. V., Kolesnikova, I. N., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. Formation of gold nanocontacts in an ultrahigh vacuum transmission electron microscope: A kinetic Monte Carlo simulation. *EPL (Europhysics Letters)* **103**, 48002 (1–6) (2013). IF = 2.481 (Web of Science).
15. Syromyatnikov, A. G., Kabanov, N. S., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Ab initio study of interaction between 3d adatoms on the vicinal Cu(111) surface. *Modern Physics Letters B* **30**, 1650218 (1–9) (2016). IF = 1.622 (Web of Science).
16. Siahaan, T., Kurnosikov, O., Swagten, H. J. M., Koopmans, B., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Co diffusion in the near-surface region of Cu. *Physical Review B* **94**, 195435 (1–10) (2016). IF = 3.836 (Web of Science).
17. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. Vacancy formation on stepped Cu(100) accelerated with STM: Molecular dynamics and kinetic Monte Carlo simulations. *Physical Review B* **80**, 245412 (1–7) (2009). IF = 3.564 (Web of Science).
18. Колесников, С. В., Клавсюк, А. Л., Салецкий, А. Моделирование процесса образования вакансий при сканировании поверхности Cu(100). *Письма в ЖЭТФ* **89**, 560—563 (2009). IF = 1.805 (Web of Science).
19. Колесников, С. В., Клавсюк, А. Л., Салецкий, А. М. Анизотропия энергетических барьеров для диффузии адатома Со вблизи островов Со на поверхности Cu(100). *Физика твердого тела* **53**, 2379—2382 (2011). IF = 1.331 (Web of Science).
20. Сыромятников, А. Г., Клавсюк, А. Л., Салецкий, А. М. Исследование взаимодействия адатомов Со на вицинальной поверхности Cu(111). *Письма в ЖЭТФ* **100**, 26—29 (2014). IF = 1.429 (Web of Science).
21. Schüller, M., Chotorlishvili, L., Melz, M., Saletsky, A., Klavsyuk, A., Toklikishvili, Z., Berakdar, J. Functionalizing Fe adatoms on Cu(001) as a nanoelectromechanical system. *New Journal of Physics* **19**, 073016 (1–8) (2017). IF = 3.660 (Web of Science).

22. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. Atomic-scale self-organization of Co nanostructures embedded into Cu(100). *Physical Review B* **79**, 115433 (1–5) (2009). IF = 3.564 (Web of Science).
23. Kolesnikov, S., Klavsyuk, A., Saletsky, A. Self-organisation and magnetic properties of Co nanostructures embedded in a Cu(100) surface. *Surface Science* **612**, 48–56 (2013). IF = 1.870 (Web of Science).
24. Клавсюк, А. Л., Колесников, С. В., Салецкий, А. М. Магнитные свойства нанокластеров Fe и Co, погруженных в первый слой поверхности Cu(100). *Письма в ЖЭТФ* **99**, 750–753 (2014). IF = 1.429 (Web of Science).
25. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. Fe and Co nanostructures embedded into Cu(100) surface: self-organization and magnetic properties. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* **148**, 706–713 (2015). IF = 1.055 (Web of Science).
26. Syromyatnikov, A. G., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. The structure phase transition in atom-wide Co wires on a vicinal Cu <111> surface. *Materials Letters* **179**, 69–72 (2016). IF = 2.572 (Web of Science).
27. Сыромятников, А. Г., Кабанов, Н. С., Салецкий, А. М., Клавсюк, А. Л. Формирование и структурный фазовый переход в атомных цепочках Co на поверхности Cu(775). *ЖЭТФ* **151**, 160–164 (2017). IF = 1.255 (Web of Science).
28. Kabanov, N., Heimbuch, R., Zandvliet, H., Saletsky, A., Klavsyuk, A. Atomic structure of self-organizing iridium induced nanowires on Ge(001). *Applied Surface Science* **404**, 12–17 (2017). IF = 4.439 (Web of Science).
29. Zhang, L., Kabanov, N. S., Bampoulis, P., Saletsky, A. M., Zandvliet, H. J. W., Klavsyuk, A. L. The Au modified Ge(110) surface. *Applied Surface Science* **439**, 101–105 (2018). IF = 5.155 (Web of Science).

30. Syromyatnikov, A. G., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Distributions of atomic wire lengths. *Physical Review B* **97**, 235444 (1–6) (2018). IF = 3.736 (Web of Science).
31. Сыромятников, А. Г., Салецкий, А. М., Клавсюк, А. Л. Зависимость распределения длин атомных цепочек на вицинальной поверхности от внешних параметров. *Письма в ЖЭТФ* **107**, 794—798 (2018). IF = 1.412 (Web of Science).
32. Сыромятников, А. Г., Салецкий, А. М., Клавсюк, А. Л. Равновесные и неравновесные состояния одномерных атомных структур. *Письма в ЖЭТФ* **110**, 331—334 (2019). IF = 1.399 (Web of Science).
33. Syromyatnikov, A. G., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. One-dimensional island size distribution: From non-equilibrium to equilibrium. *Surface Science* **693**, 121528 (1–4) (2020). IF = 1.466 (Web of Science).
34. Syromyatnikov, A. G., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Stability and magnetism on the atomic scale: atom-wide wires on vicinal metal substrate. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **510**, 166896 (1–4) (2020). IF = 2.717 (Web of Science).
35. Syromyatnikov, A. G., Guseynova, M. R., Saletsky, A. M., Klavsyuk, A. L. Non-equilibrium island size distribution in one dimension. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2020**, 093202 (2020). IF = 2.371 (Web of Science).

Иные публикации (статьи в сборниках материалов конференций)

1. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Smelova, E. M., Saletsky, A. M. *Structure, quantum effects and magnetism in transition metal nanocontacts* in *The 2nd Russian-Japanese Young Scientists Conference on Nano-Materials and NanoTechnology* (Tokyo, Japan, 2010), 2.
2. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M. *Structure, quantum effects and magnetism in Pd contacts* in *DUBNA-NANO2010* (Dubna, Russia, 2010), 83.

3. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. *Ripening of monolayer vacancy pits in co thin film on Cu(100) surface* in *DUBNA-NANO2010* (Dubna, Russia, 2010), 91.
4. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. *Vacancy formation on stepped Cu(100) surface during scanning with STM* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 27)* (Groningen, Netherlands, 2010), 186.
5. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M. *Structure, quantum effects and magnetism in transition metal nanocontacts* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 27)* (Groningen, Netherlands, 2010), 233.
6. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M. *Self-organization of magnetic nanostructures embedded into Cu(100) surface* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 29)* (Edinburgh, United Kingdom, 2012), 475.
7. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M. *Structure and evolution of a gold nanowires at the room temperature: a kinetic monte carlo investigation* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 29)* (Edinburgh, United Kingdom, 2012), 394.
8. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M. *Magnetism and self-organization of 3d metals nanostructures embedded into Cu(100)* in *Proceedings of the Joint European Magnetic Symposia (JEMS 2012)* (Parma, Italy, 2012), 372.
9. Klavsyuk, A. L., Kolesnikov, S. V., Saletsky, A. M. *Magnetism and self-organization of Co nanostructures embedded into Cu(100)* in *DUBNA-NANO2012* (Dubna, Russia, 2012), 85.
10. Kolesnikov, S. V., Klavsyuk, A. L., M., S. A. *Formation of Au nanocontacts at the room temperature: a Kinetic Monte Carlo investigation* in *DUBNA-NANO2012* (Dubna, Russia, 2012), 89.

11. Klavsyuk, A. L., Saletsky, A. M. *Magnetic anisotropy in a single-atom tunneling junction: ab initio calculations* in *Proceedings of the Joint European Magnetic Symposia (JEMS 2013)* (Rhodes, Greece, 2013), 333.
12. Klavsyuk, A., Syromyatnikov, A., Kabanov, N., Saletsky, A. *Atomic one-dimensional system stabilized by surface-state electrons* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 23)* (Antalya, Turkey, 2014), 617.
13. Klavsyuk, A., Nagayuk, D., Saletsky, A., Tonkikh, A., Zakharov, N., Werner, P. *Stability and Electronic band structure of SnSi Nanocrystals in a Si Matrix* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 31)* (Barcelona, Spain, 2015), 553.
14. Kabanov, N., Saletsky, A., Klavsyuk, A. *Atomic structure of Ir nanowires on Ge(001)* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 31)* (Barcelona, Spain, 2015), 554.
15. Klavsyuk, A. L., Syromyatnikov, A. G., Kabanov, N. S. *Ab initio study of structure transition in atom-wide Co wires on a vicinal Cu(111) surface* in *Book of Abstracts, European Conference on Surface Science (ECOSS 32)* (Grenoble, France, 2016), 443.
16. Klavsyuk, A. L., Zhang, L., Kabanov, N. S., R., H., Saletsky, A. M., Zandvliet, H. J. W. *Structural and electronic properties of Ir/Ge(001) and Au/Ge(110)* in *International Conference on Nanoscience + Technology (ICN+T) 2018* (Brno, Czech Republic, 2018).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Игнатов, А. *Нанозлектроника. Состояние и перспективы развития* (М.: ФЛИНТА, 2012).
2. Чаплыгин, Ю. *Нанотехнологии в электронике*. (М.: Техносфера, 2013).

3. Paul, W., Oliver, D., Grütter, P. Indentation-formed nanocontacts: an atomic-scale perspective. *Physical Chemistry Chemical Physics* **16**, 8201–8222 (2014).
4. Smit, R. H. M., Untiedt, C., Yanson, A. I., van Ruitenbeek, J. M. Common Origin for Surface Reconstruction and the Formation of Chains of Metal Atoms. *Physical Review Letters* **87**, 266102 (2001).
5. Egle, S., Bacca, C., Pernau, H.-F., Huefner, M., Hinzke, D., Nowak, U., Scheer, E. Magnetoresistance of atomic-size contacts realized with mechanically controllable break junctions. *Physical Review B* **81**, 134402 (2010).
6. Hansen, K., Lægsgaard, E., Stensgaard, I., Besenbacher, F. Quantized conductance in relays. *Physical Review B* **56**, 2208–2220 (1997).
7. Bettini, J., Sato, F., Coura, P. Z., Dantas, S. O., Galvão, D. S., Ugarte, D. Experimental realization of suspended atomic chains composed of different atomic species. *Nature Nanotechnology* **1**, 182–185 (2006).
8. Enomoto, A., Kurokawa, S., Sakai, A. Quantized conductance in Au-Pd and Au-Ag alloy nanocontacts. *Physical Review B* **65**, 125410 (2002).
9. Heemskerk, J. W. T., Noat, Y., Bakker, D. J., van Ruitenbeek, J. M., Thijssen, B. J., Klaver, P. Current-induced transition in atomic-sized contacts of metallic alloys. *Physical Review B* **67**, 115416 (2003).
10. Rodrigues, V., Sato, F., Galvão, D. S., Ugarte, D. Size Limit of Defect Formation in Pyramidal Pt Nanocontacts. *Physical Review Letters* **99**, 255501 (2007).
11. Lagos, M. J., Sato, F., Autreto, P. A. S., Galvão, D. S., Rodrigues, V., Ugarte, D. Temperature effects on the atomic arrangement and conductance of atomic-size gold nanowires generated by mechanical stretching. *Nanotechnology* **21**, 485702 (2010).
12. Rodrigues, V., Fuhrer, T., Ugarte, D. Signature of Atomic Structure in the Quantum Conductance of Gold Nanowires. *Physical Review Letters* **85**, 4124–4127 (2000).

13. Kondo, Y., Takayanagi, K. Gold Nanobridge Stabilized by Surface Structure. *Physical Review Letters* **79**, 3455–3458 (1997).
14. Shen, J., Skomski, R., Klaua, M., Jenniches, H., Manoharan, S. S., Kirschner, J. Magnetism in one dimension: Fe on Cu(111). *Physical Review B* **56**, 2340–2343 (1997).
15. Shen, J., Klaua, M., Ohresser, P., Jenniches, H., Barthel, J., Mohan, C. V., Kirschner, J. Structural and magnetic phase transitions of Fe on stepped Cu(111). *Physical Review B* **56**, 11134–11143 (1997).
16. Gambardella, P., Blanc, M., Bürgi, L., Kuhnke, K., Kern, K. Co growth on Pt(997): from monatomic chains to monolayer completion. *Surface Science* **449**, 93–103 (2000).
17. Shiraki, S., Fujisawa, H., Nantoh, M., Kawai, M. Confining Barriers for Surface State Electrons Tailored by Monatomic Fe Rows on Vicinal Au(111) Surfaces. *Physical Review Letters* **92**, 096102 (2004).
18. Bellisario, D. O., Han, J. W., Tierney, H. L., Baber, A. E., Sholl, D. S., Sykes, E. C. H. Importance of Kinetics in Surface Alloying: A Comparison of the Diffusion Pathways of Pd and Ag Atoms on Cu(111). *The Journal of Physical Chemistry C* **113**, 12863–12869 (2009).
19. Venables, J. A., Spiller, G. D. T., Hanbucken, M. Nucleation and growth of thin films. *Reports on Progress in Physics* **47**, 399 (1984).
20. Brune, H. Microscopic view of epitaxial metal growth: nucleation and aggregation. *Surface Science Reports* **31**, 125–229 (1998).
21. Gambardella, P., Brune, H., Kern, K., Marchenko, V. I. Equilibrium island-size distribution in one dimension. *Physical Review B* **73**, 245425 (2006).
22. Zaki, N., Potapenko, D., Johnson, P. D., Osgood, R. M. Atom-wide Co wires on Cu(775) at room temperature. *Physical Review B* **80**, 155419 (2009).
23. Brune, H., Bales, G. S., Jacobsen, J., Boragno, C., Kern, K. Measuring surface diffusion from nucleation island densities. *Physical Review B* **60**, 5991–6006 (1999).

24. Zaki, N., Marianetti, C. A., Acharya, D. P., *et al.* Experimental observation of spin-exchange-induced dimerization of an atomic one-dimensional system. *Physical Review B* **87**, 161406 (2013).
25. Hansen, O., Ravnkilde, J. T., Quaade, U., Stokbro, K., Grey, F. Field-Induced Deformation as a Mechanism for Scanning Tunneling Microscopy Based Nanofabrication. *Physical Review Letters* **81**, 5572–5575 (1998).
26. Pick, S., Stepanyuk, V. S., Klavsyuk, A. L., Niebergall, L., Hergert, W., Kirschner, J., Bruno, P. Magnetism and structure on the atomic scale: Small cobalt clusters in Cu(001). *Physical Review B* **70**, 224419 (2004).
27. Lazarovits, B., Szunyogh, L., Weinberger, P., Újfalussy, B. Magnetic properties of finite Fe chains at fcc Cu(001) and Cu(111) surfaces. *Physical Review B* **68**, 024433 (2003).
28. Bruno, P. Tight-binding approach to the orbital magnetic moment and magnetocrystalline anisotropy of transition-metal monolayers. *Physical Review B* **39**, 865–868 (1989).