УДК 538.971 + 538.913 + 538.915

DOI: 10.17223/00213411/63/6/77

С.Д. БОРИСОВА, Г.Г. РУСИНА

**ВИБРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ПЕРЕХОДНЫХ 3d-МЕТАЛЛОВ
НА ПОВЕРХНОСТИ (111) Cu ***

С использованием потенциалов, полученных методом сильной связи, проведены расчеты равновесной атомной структуры и фононных спектров тонких пленок (1 монослой) Cr и Ni, осажденных на поверхность Cu (111). Рассматривается атомная релаксация, распределение плотности колебательных состояний на атомах Cr, Ni и подложки, а также поляризация колебательных мод. Обсуждается изменение фононного спектра при осаждении пленки и сегрегации атомов Cu на поверхности пленки. Показано, что смешивание колебаний атомов Cr и Ni с колебаниями атомов подложки происходит во всем диапазоне частот, приводя к частотному сдвигу колебательных мод подложки и появлению новых колебательных состояний, не свойственных чистой поверхности. Структуры Cu/Cr/Cu и Cu/Ni/Cu являются динамически более стабильными.

Ключевые слова: тонкие пленки, релаксация, фононы.

Введение

Тонкие пленки 3d-переходных металлов на различных подложках вызывают большой интерес, так как демонстрируют уникальные физико-химические, магнитные и оптические свойства [1–9]. Для исследования свойств тонких пленок удобными модельными объектами являются системы Cr/Cu и Ni/Cu. С одной стороны, малый параметр несоответствия решеток, не более 2.5 %, означает возможность псевдоморфного роста пленки [5]. С другой стороны, положительная разница поверхностных энергий между подложкой и пленкой (Cu – 1.8 Дж/м², Ni – 2.24 Дж/м², Cr – 2.04 Дж/м²) означает, что возможна сегрегация атомов Cu над слоем пленки [6, 7]. Это позволяет провести сравнительный анализ и выявить характерные особенности и закономерности формирования сверхтонких пленок переходных металлов 3d-ряда с разным структурным типом на поверхности медной подложки.

Имеющиеся экспериментальные данные не дают однозначного ответа о преобладающем механизме роста пленок переходных металлов. Например, для пленки Ni на Cu (001) в работе [8] фиксировался псевдоморфный рост пленки, тогда как в работе [5] наблюдалась диффузия атомов Ni в подповерхностный слой меди. При этом в обоих случаях использовался метод дифракции медленных электронов. Теоретический *ab initio* расчет также показал энергетическую выгоду диффузии Ni в подповерхностный слой медной подложки [9].

Одним из важных аспектов формирования стабильных пленок является динамическое поведение системы, которое напрямую определяется характером межатомного взаимодействия адатом – подложка. С учетом вибрационных свойств взаимодействие адатомов с атомами подложки инициирует образование новых локализованных или резонансных мод, что оказывает влияние на фононную подсистему и условия роста осаждаемой пленки. Данному аспекту в исследовании устойчивого роста пленок уделено недостаточно внимания. Имеется лишь несколько работ, посвященных колебательным свойствам пленки Ni на поверхности Cu (001) [10–12].

В представленной работе проведено теоретическое исследование структурных и вибрационных характеристик систем Cr(ОЦК)/Cu (111) и Ni(ГЦК)/Cu (111). Проведены расчеты атомной релаксации, фононных спектров поверхности Cu (111) с различным положением монослоев Ni и Cr. Для исследования межатомных взаимодействий использовался метод сильной связи.

1. Метод расчета

Расчет равновесной атомной и фононной структуры проводился с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, полученных методом сильной связи (ТВА – Tight-Binding Approximation). Метод состоит в том, что связующие свойства переходных металлов определяются большой плотностью их *d*-состояний. Многие термодинамические и структурные параметры яв-

* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, проект III.23.2.9.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://www.elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>