

**ДИНАМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СУБМОНОСЛОЙНЫХ ПЛЕНОК
ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ (110) Cu***

С.Д. Борисова, Г.Г. Русина

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Работа посвящена теоретическому исследованию структурных и колебательных характеристик двумерной пленки щелочного металла (Li, Na, K), осажденной на нереконструированную и реконструированную поверхность Cu (110). Были проведены расчеты равновесной атомной конфигурации, векторов поляризации локализованных колебательных мод, а также локальной плотности колебательных состояний для разных степеней адсорбции щелочного металла. Все вычисления проводились с использованием межатомных потенциалов, полученных в рамках метода погруженного атома. Полученные численные значения структурных параметров, частоты и поляризации локализованных мод находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Ключевые слова: динамика поверхности, фононы, тонкие пленки, реконструкция поверхности.

Введение

Адсорбция часто приводит к образованию новых кристаллических структур, которые предполагают определенную реконструкцию поверхности подложки [1, 2]. В частности, открытая геометрия поверхности (110) ГЦК-металлов, определяемая отсутствием плотной упаковки вдоль одного ряда, делает ее неустойчивой к реконструкции при внешнем воздействии [2]. Экспериментально [3–5] было показано, что локальная реконструкция отсутствующего ряда (1×2) возникает при степени покрытия 0.16 и 0.25 монослоя (МС) Li и Na. В этом случае отсутствуют атомы Cu вдоль направления $[\bar{1}10]$ в каждом втором ряду поверхностного слоя. Адсорбция K на поверхность Cu (110) при аналогичных степенях покрытия также приводит к реконструкции отсутствующего ряда (1×3), но в данном случае атомы меди отсутствуют в каждом третьем ряду вдоль направления $[\bar{1}10]$ [6]. При этом отмечается, что такая реконструкция имеет локальный характер и протекает при комнатной температуре [7, 8]. Локальность поверхностной реконструкции при субмонослойной адсорбции щелочных металлов (ЩМ) ограничивает возможности экспериментальных исследований физико-химических свойств адсорбционной системы. Одним из возможных методов исследования является определение колебательного спектра адатомов, чувствительного к геометрии адсорбции и отражающего характер взаимодействия адатомов между собой и с подложкой. Важным аспектом является исследование атомной перестройки поверхностного слоя подложки, в результате которой возникают новые локализованные или резонансные колебательные моды, оказывающие влияние на динамические процессы, протекающие на поверхности подложки [9–11].

В настоящей работе представлены результаты теоретического исследования динамического поведения сверхтонких металлических пленок на поверхности Cu (110) и влияния реконструкции поверхностного слоя подложки. Были проведены расчеты атомной релаксации всей адсорбционной системы и распределения плотности атомных колебаний на адслое и приповерхностных слоях подложки. Кроме того, осуществлен сравнительный анализ влияния плотности осаждаемой пленки и реконструкции поверхности подложки на динамическую стабильность пленки. Расчеты проводились для различных степеней адсорбции Li, Na и K на нереконструированной и реконструированной поверхности Cu (110).

1. Метод расчета

Для расчетов атомной и фононной структуры были использованы межатомные потенциалы, построенные в рамках метода погруженного атома [12]. Параметры метода подгонялись под экспериментальные значения параметра решетки, равновесного объема, упругих постоянных, энергий сублимации и образования вакансий Cu, Li, Na и K. Потенциалы взаимодействия атомов разных элементов используются в форме, предложенной в работе [13] и ранее успешно применялись для расчетов релаксации и фононов поверхностей с адсорбатами [14]. Поверхность (110) моделирова-

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект № FWRW-2022-0001.

Уважаемые читатели!

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

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