

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ИНТЕРФЕЙСНОЙ ГРАНИЦЫ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ Ag/Cu

А.М. Игошкин, И.Ф. Головнев, В.М. Фомин

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Россия*

Современные технические приложения, например микроэлектроника, предъявляют повышенные требования к параметрам используемых в них тонких пленок. Поэтому в настоящее время так востребованы исследования осаждения нанопленок с управляемыми свойствами из газовой фазы. Вместе с тем, большой проблемой является исследование структуры формируемых нанообъектов. Современные методики, такие как СТМ, позволяют визуализировать только кристаллическую структуру поверхности, не проникая в толщу материала. Это серьезно ограничивает возможности эксперимента и заставляет прибегать к различным теоретическим подходам, в которых моделируются исследуемые нанообъекты на атомарном уровне. К ним относятся метод молекулярной динамики, Монте-Карло, а также прямые квантовые расчеты. Самым мощным среди них при работе с системами порядка нескольких тысяч атомов является метод молекулярной динамики, что обуславливает его актуальность при решении данного круга задач.

В работе рассматривается формирование серебряных нанослоев на поверхности медных подложек с различными ориентациями посредством моделирования осаждения серебра из пучка методом молекулярной динамики. Взаимодействие между атомами описывалось многочастичным потенциалом Воутера [1], полученным в рамках метода внедренного атома [2]. Моделирование эпитаксии серебра производилось с помощью метода прямого статистического моделирования. При этом предполагалось, что координаты атомов описываются равномерным распределением, а их начальные энергии одинаковые. Температура подложки была зафиксирована на постоянном уровне путем введения диссипативного члена в уравнения движения атомов подложки [3]. Все компоненты тензора напряжений формирующихся гетероструктур поддерживались при нулевых значениях [4].

После осаждения нанослоев конечная структура охлаждалась до абсолютного нуля. Были рассмотрены пленки, полученные при температурах 30К, 100К, 200К, 300К, 400К, 500К, 600К, 750К.

В ходе исследований обнаружено, что шероховатость поверхности тонкой серебряной пленки и средняя адсорбционная энергия атомов в ней уменьшаются при увеличении температуры ее формирования. Данные закономерности обусловлены интенсификацией диффузионных процессов, происходящей при увеличении температур. Также было показано, что на интерфейсе данных материалов возможно формирование двух различных типов сверхструктур: муаровых и треугольных. Первая из них возникает при наложении двух бездефектных кристаллических решеток друг на друга, в результате чего на границе их раздела формируется периодический рисунок из выступов и углублений. Возникновение треугольной сверхрешетки становится возможным, когда в верхней плоскости подложки часть атомов переходят из ГЦК позиций в энергетически более выгодные в данных условиях ГПУ позиции. При этом происходит формирование поверхностных дислокационных петель треугольной формы. В результате чего на нижней плоскости серебряной пленки возникают периодически расположенные углубления в форме треугольников.

При моделировании формирования серебряного нанослоя на медной (111) подложке было показано, что вблизи нижней грани исследованного диапазона температур на интерфейсе данных материалов возникают муаровые суперструктуры. При повышении температуры формирования тонкой пленки растет вероятность появления треугольных дислокационных петель в верхней плоскости подложки. При этом в расчетах наблюдаются лишь единичные случаи возникновения треугольной сверхрешетки на интерфейсе Ag/Cu(111). Основной причиной, не позволяющей формироваться данным суперструктурам является то, что моделируемые времена в молекулярно-динамических расчетах малы по сравнению с характерными временами процессов диффузии в твердых телах. Поэтому формирования равновесной конфигурации интерфейса не происходит. При этом, зависимость вероятности возникновения поверхностных дислокационных петель на интерфейсе Ag/Cu(111) от температуры, находится в качественном согласии с известными экспериментальными данными [5].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Voter A.F.** Embedded atom method potentials for seven fcc metals: Ni, Pb, Pt, Cu, Ag, Au and Al // Los Alamos Unclassified technical report # LA-UR 93-3901, 1993.
2. **Daw M. S., Baskes M. I.** Embedded atom method: derivation and application to impurities, surfaces and other defects of metals // Phys. Rev. B, 1984, V. 29, P. 6443.
3. **Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R.** Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys., 1984, V. 81, P. 3684.
4. **Parrinello M., Rahman A.** Crystal Structure and Pair Potentials: A Molecular-Dynamics Study // Phys. Rev. Lett., 1980, V. 45, P. 1196-1199.
5. **Aufroy B., Gothelid M., Gay J.M., Mottet C., Landemark E., Falkenberg G., Lottermoser L., Seehofer L., Johnson R. L.** Ag/Cu (111): an incommensurate reconstruction studied with scanning tunneling microscopy and surface x-ray diffraction // Microsc. Microanal. Microstruct., 1997, V. 8, P. 167-174.