

05

Компьютерное моделирование вертикального роста подповерхностных нанокластеров кобальта в золоте

© Д.В. Куликов, О. Курносиков, М. Сико, Ю.В. Трушин

Санкт-Петербургский физико-технологический научно-образовательный
центр РАН, Санкт-Петербург
E-mail: trushin@edu.ioffe.ru
Технологический университет Эйндрховена,
5600 MB Эйндрховен, Нидерланды

Поступило в Редакцию 10 июля 2008 г.

С помощью компьютерного моделирования исследовался вертикальный рост наноразмерных кластеров кобальта, захороненных под поверхностью золота. Учитывались процессы взаимодиффузии атомов золота и кобальта, а также поля упругих напряжений, созданные захороненными кластерами кобальта. Получены временные зависимости концентраций атомов кобальта и золота в приповерхностных слоях. Определены характерные времена замещения золота кобальтом в слоях над захороненными кластерами. Проведено сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными.

PACS: 68.37.Ps, 61.43.Bn

Исследования нанокластеров кобальта на различных металлических подложках представляют особый интерес в связи с возможным использованием таких структур для создания устройств хранения информации с высокой плотностью на магнитной основе [1]. Известно, что при осаждении кобальта на поверхность (111) золота образуются плоские упорядоченные кобальтовые кластеры размером порядка нескольких нанометров [1–3]. Однако для создания плотноупакованных ферромагнитных структур, необходимых в возможных приложениях, требуется увеличить объем кластеров, не изменяя при этом их радиуса, что возможно достичь за счет увеличения высоты кластеров. В работах [2,3] предложен, а в работе [4] развит метод вертикального роста упорядоченных кластеров кобальта в золоте путем последовательного осаждения слоев золота и кобальта различной толщины. Схема

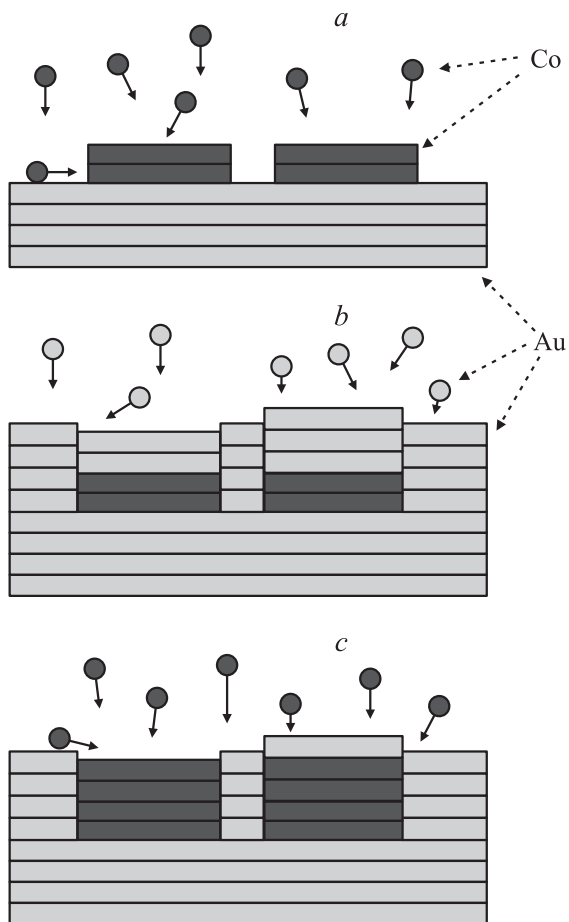


Рис. 1. Схематическое представление метода выращивания вертикальных кластеров кобальта, захороненных в золоте.

этого метода представлена на рис. 1. Вначале на поверхность (111) золота осаждается слой кобальта толщиной менее одного монослоя при комнатной температуре, в результате чего образуются упорядоченные кобальтовые кластеры (рис. 1, a). Затем при повышенной

температуре проводится осаждение слоя золота такой толщины, что кобальтовые кластеры оказываются захороненными двумя монослоями золота (рис. 1, *b*). После этого — повторное осаждение кобальта, в ходе которого наблюдается вертикальный рост захороненных кластеров (рис. 1, *c*). Далее образец охлаждается до комнатной температуры. Детали экспериментов подробно изложены в работах [2,3].

В настоящей работе предлагается модель вертикального роста уже захороненных в золоте кобальтовых кластеров при повторном осаждении кобальта и последующем охлаждении образцов.

Положения модели следующие.

1. Предполагается, что атомы кобальта, осаждаемые на поверхность золота, диффундируют по ней к тем местам, где захоронены кластеры. Их энергия активации миграции $\varepsilon_{sur}^m = 0.16 \text{ eV}$ [5]. Тогда можно оценить характерную длину диффузии по поверхности как $L_s = \sqrt{D_s t^{dep}}$, где $D_s \approx a^2 \nu \exp(-\varepsilon_{sur}^m/kT)$ — коэффициент поверхностной диффузии кобальта, T — температура, при которой проводится осаждение, а $t^{dep} = 150 \text{ s}$ — время осаждения кобальта, используемое в эксперименте [2], k — постоянная Больцмана, a — межатомное расстояние, ν — характерная частота колебаний атомов порядка частоты Дебая. Отсюда получаем $L_s \approx 4 \cdot 10^6 \text{ nm}$. При этом в экспериментах [2,4] расстояние по поверхности между захороненными кластерами порядка 10 nm , т.е. много меньше диффузионной длины. Поэтому можно считать поверхностную диффузию быстрым процессом по отношению ко времени осаждения кобальта. Следовательно, полагаем, что осажденные атомы кобальта быстро (в сравнении с длительностью осаждения) диффундируют к тем местам, где захоронены кластеры, и далее остаются на поверхности золота над кластерами в течение всего времени осаждения. Это позволяет не рассматривать отдельно поверхностную диффузию кобальта.

2. Вследствие разницы постоянных решетки золота и кобальта [3], захороненные кобальтовые кластеры создают в матрице золота вокруг себя поля упругих напряжений. Поэтому на атомы кобальта, осажденные на поверхность золота, действует сила упругого притяжения к захороненному кластеру кобальта. По той же причине на атомы золота в кристаллической решетке над кобальтовым кластером действует сила упругого отталкивания от него. Предполагается, что в результате этого и происходит взаимодиффузия атомов золота и кобальта по обменному

механизму: кобальт диффундирует с поверхности к кластеру, а золото из атомных слоев над кластером — на поверхность, причем диффузия возможна при наличии атомов золота и кобальта в соседних узлах.

Опираясь на кинетическую теорию диффузионных процессов в твердых телах [6–8], запишем систему кинетических уравнений для концентраций атомов золота ($C_{Au}(t, x)$) и кобальта $C_{Co}(t, x)$ в слоях над кобальтовым кластером, зависящих от времени t и глубины от поверхности x , а также для концентрации атомов кобальта на поверхности $N_{Co}(t)$ с учетом перечисленных процессов:

$$\frac{\partial C_{Au}(t, x)}{\partial t} = -\text{div} J_{Au}(t, x), \quad (1)$$

$$C_{Co}(t, x) = \rho_{nc} - C_{Au}(t, x), \quad (2)$$

$$\frac{\partial N_{Co}(t)}{\partial t} = g - D \frac{\partial C_{Au}(t, x)}{\partial x} \Big|_{x=0} - \frac{DC_{Au}(t, x)}{kT} \frac{\partial W(x)}{\partial x} \Big|_{x=0}. \quad (3)$$

Здесь

$$J_{Au}(t, x) = -D \frac{\partial C_{Au}(t, x)}{\partial x} - \frac{DC_{Au}(t, x)}{kT} \frac{\partial W(x)}{\partial x} \quad (4)$$

— диффузионный поток атомов золота, $D \approx a^2 \nu \exp(-\varepsilon_{int}^m/kT)$ — коэффициент взаимодиффузии, ε_{int}^m — энергия активации взаимодиффузии, T — текущая температура (разная при осаждении кобальта и последующем охлаждении), ρ_{nc} — ядерная плотность золота, g — скорость осаждения кобальта, $W(x)$ — энергия взаимодействия атомов золота с полем напряжения, созданным захороненным кластером кобальта.

При этом должны выполняться граничные условия:

$$J_{Au}(t, x) \Big|_{x=2a} = 0, \quad (5)$$

$$C_{Au}(t, x) \Big|_{x=0} = 0. \quad (6)$$

Поскольку рассматривается взаимодиффузия атомов золота и кобальта по обменному механизму (что может быть, когда они находятся в соседних узлах, см. предположение 2 модели), необходимо учесть, что диффузия золота из пленки на поверхность возможна только при наличии атомов кобальта на поверхности. Следовательно, к граничным условиям (5) и (6) добавляется условие для коэффициента взаимодиффузии при $x = 0$:

$$D \Big|_{x=0} = DN_{Co}(t)/N_{surf}, \quad (7)$$

где N_{surf} — поверхностная ядерная плотность.

Параметры экспериментов из работ [2,4]

Параметры экспериментов	[2] (A)	[4] (B)
Время осаждения кобальта	$t_A^{dep} = 600 \text{ s}$	$t_B^{dep} = 150 \text{ s}$
Скорость осаждения кобальта	$g_A \approx 5.3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$	$g_B \approx 2.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
Температура осаждения	$T_A = 500 \text{ K}$	$T_B = 460 \text{ K}$
Время охлаждения до комнатной температуры после осаждения	$t_A^c \approx 1800 \text{ s}$	$t_B^c \approx 1800 \text{ s}$

Для энергии взаимодействия $W(x)$ атомов золота с полем напряжений используется следующее приближение: энергия возрастает линейно от нуля до значения W_{\max} при изменении глубины x от 0 до $2a$. При этом W_{\max} оценивается как

$$W_{\max} \approx \Delta\Omega E \gamma. \quad (8)$$

Здесь $\Delta\Omega \approx 8 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$ [1] — разница атомных объемов золота и кобальта (см. предположение 2 модели), $E = 7.8 \cdot 10^9 \text{ Pa}$ [9] — модуль Юнга золота, а $\gamma \approx 14\%$ [3] — относительная деформация на границе золота и кластера кобальта. Подставляя эти численные значения в (8), получим $W_{\max} \approx 0.5 \text{ eV}$.

Система уравнений (1)–(3) с граничными условиями (5)–(7) решалась численно для параметров осаждения, используемых в работах [2,4] (см. таблицу).

На рис. 2 приведены результаты расчетов относительной концентрации кобальта над кластером кобальта в зависимости от времени осаждения и охлаждения для соответствующих наборов параметров A и B , взятых соответственно из работ [2] и [4]. Откуда видно, что к моменту охлаждения t_j^c ($j = A, B$) образцов до комнатной температуры относительная концентрация кобальта в слоях над кластером кобальта вырастает до единицы, а следовательно, относительная концентрация золота падает практически до нуля. Таким образом, захороненные кластеры кобальта „прорастают“ до поверхности, что и наблюдается в экспериментах [2,4]. В ходе расчетов варьировалась энергия активации миграции взаимодиффузии ε_{int}^m , неизвестная из литературы. Энергия подбиралась так, чтобы обеднение золотом атомных слоев над кобальтовыми кластерами (а значит, и обогащение кобальтом) происходило за

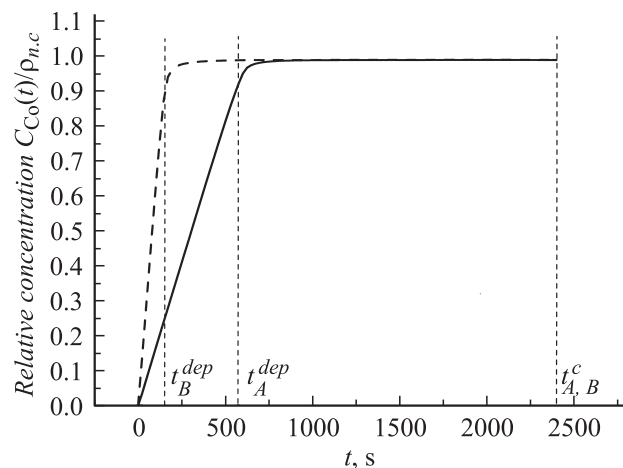


Рис. 2. Зависимости относительной концентрации кобальта $C_{Co}(t)/\rho_{nc}$ от времени над захороненным кластером кобальта: сплошная линия — параметры осаждения [2] — A , пунктирная линия — параметры осаждения [4] — B .

времена, приблизительно равные времени осаждения кобальта t_A^{dep} для экспериментальных результатов из работы [2]. При этом получено, что такая оценка энергии ε_{int}^m позволяет также удовлетворительно описать и результаты эксперимента в работе [4].

Предложена физическая модель, с помощью которой удалось впервые описать процессы вертикального роста захороненных в золоте кобальтовых кластеров. В модели рассмотрена взаимодиффузия кобальта и золота в процессе осаждения кобальта на поверхность золота с захороненными кобальтовыми кластерами, а также учтено взаимодействие диффундирующих атомов с полем упругих напряжений, созданных кластерами кобальта. Рассчитаны временные зависимости концентраций кобальта и золота в слоях над захороненными кобальтовыми кластерами. Получено, что за время осаждения кобальта и последующего охлаждения образца золото в слоях над кластерами замещается кобальтом.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 07-02-01052-а), а также научной программы СПб. НЦ РАН на 2008 г.

Список литературы

- [1] *Morgenstern K., Kibsgaard J., Lauritsen J.V., Laegsgaard E., Bosenbacher F.* // Surf. Sci. 2007. V. 601. P. 1967.
- [2] *Fruchart O., Klaua M., Bartelt J., Kirschner J.* // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 2769.
- [3] *Padovani S., Scheurer F., Boucher J.P.* // Europhys. Lett. 1999. V. 45. P. 327.
- [4] *Sicot M., Kurnosikov O., Swagen H.J.M., Koopmans B.* // Dutch Scanning Probe Microscopy Symposium-2007. Leiden University. 2007. P. 12.
- [5] *Bulou H., Lucas O., Kibaly M., Goyhene C.* // Comp. Mater. Science. 2003. V. 27. P. 181.
- [6] *Trushin Yu.V.* Theory of Radiation Processes in Metal Solid V, Solutions. New York: Nova Science Publishers Inc. 1996. 405 p.
- [7] *Trushin Yu.V.* // J. Nucl. Mater. 1991. V. 185. P. 279.
- [8] *Safonov K.L., Schmidt A.A., Trushin Yu.V., Kulikov D.V., Pezoldt J.* // Materials Sci. Forum. 2003. V. 433–436. P. 591.
- [9] <http://www.webelements.com/webelements/elements/text/Au/phys.html>