ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии»

6–10 сентября 2021 г.
Томск, Россия

Томск – 2021
Издательство ТГУ

DOI: 10.17223/978-5-907442-03-0-2021-070

АТОМНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ Cu(111)−(√3×√3)R30°–Cr

Борисова С.Д., Русина Г.Г.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Исследованию роста пленок переходного 3d-металла Cr на простых поверхностях Cu уделяется большое внимание [1,2]. Одним из важных аспектов этих исследований является возможность стабилизации метастабильной фазы осаждаемого металла с кристаллографической структурой и параметром решетки, отличными от их объемных значений. Особенно это важно на начальном этапе роста пленки. Изучение взаимодействия адсорбат-подложка на данном этапе роста является критически важным для микроскопического понимания поверхностно-активных процессов, таких как адсорбция и десорбция, каталитические реакции, трение и эпитаксиальный рост. Исследование колебательных свойств является одним из возможных способов изучения взаимодействия на атомном уровне.

С использованием приближения сильной связи были исследованы структурные и колебательные свойства адсорбционной структуры (√3×√3)R30°–Cr на поверхности Cu(111) и двумерного сплава Cu(111)–(√3×√3)R30°–Cr, инкорпорированного в S-1 слой подложки. На рис. 1 представлены рассчитанные фононные спектры соответствующих структур.

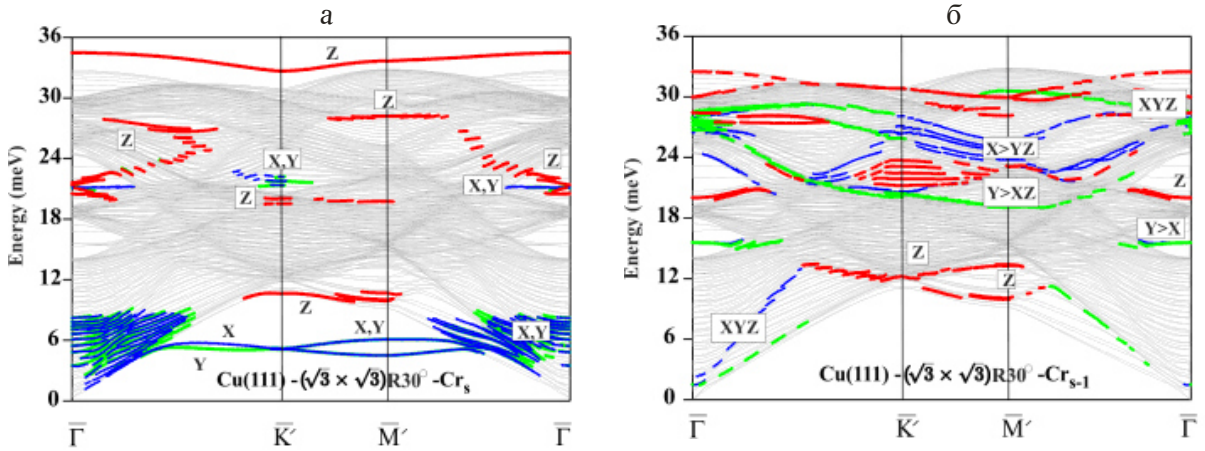

Рис. 1. Фононный спектр адсорбционной сверхструктуры (√3×√3) R30°–Cr на поверхности Cu (111) (а); Фононный спектр двумерного сплава Cu (111)–(√3×√3)R30°–Cr, расположенного в S-1 слое подложки (б)

На основе анализа полученных данных по релаксации и колебательным свойствам рассмотренных систем показано, что наибольшей стабильностью обладает подповерхностный сплав Cu(111)-(√3×√3)R30°-Cr. Расчеты полной энергии системы Cu/Cr также показали энергетический выигрыш в 0.025 eV в сравнении с адсорбционной структурой (√3×√3)R30°-Cr.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2019-0032.

1. Harzer T.P., Djaziri S., Raghavan R., Dehm G. Nanostructure and mechanical behavior of metastable Cu–Cr thin films grown by molecular beam epitaxy // Acta Mater. 2015. №83. P. 318–332.
2. Asada T., Bihlmayer G., Handschuh S., Heinze S., Kurz Ph., and Blugel S., First-principles theory of ultrathinmagnetic films // J. Phys.: Condens. Matter. 1999. V. 11. P. 9347–9363.