

сов лучевых пакетов M -моды, показывает, что для заданных $\delta^{(l)}$ азимутальное распределение фазы становится более равномерным при приближении r к значению $r^{(l)}$. Если r оказывается ниже некоторого критического значения r_{cr} , то при $\delta^{(l)}=0$ осцилляции амплитуды и фазы становятся пренебрежимо малыми, и M -мода теряет качество винтового поля. Для моды с $N=4$ $r_{cr} \approx 0,5\omega$. С ростом N значение r_{cr} увеличивается.

При сопоставлении результатов расчета с данными эксперимента следует считать, что в резонаторе лазера может возбуждаться несколько M -мод с одинаковым значением N , но с разной ориентацией лучевых пакетов. Так, на рис. 2, а видно присутствие второй M -моды с более слабой интенсивностью. Как правило, эффекты пространственной синхронизации приводят к частотному захвату генерируемых M -мод и установлению между ними определенной разности фаз. В зависимости от соотношения интенсивностей мод и величины разности фаз характер амплитудно-фазовых распределений может претерпеть заметные изменения.

Таким образом, изложенные подходы к геометрическому толкованию свойств винтовых полей делают более наглядными представления об их физической природе, позволяют упростить расчеты характеристик излучения, более полно описать особенности азимутального транспорта энергии в открытых резонаторах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бабич В. М., Буддырев В. С. Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн. М., 1972.
2. Цибуля А. Б., Чертов В. Г., Шерешев А. В. // Оптико-механическая промышленность. 1977. № 10. С. 66.
3. Ваганов Р. Б., Каценеленбаум Б. З. Основы теории дифракции. М., 1982.
4. Салимено С., Крозиньяни Б., Порто Д. Дифракция и волноводное распространение оптического излучения. М., 1989.
5. Couillet P., Gil L., Rossa F. // Opt. Commun. 1989. 73, N 5. P. 403.
6. Аняньев Ю. А., Аникичев С. Г. // Опт. и спектр. 1989. 67, № 3. С. 693.
7. Горячев С. Б., Короленко П. В., Новоселов А. Г. и др. // Письма в ЖТФ. 1984. 10, № 7. С. 429.
8. Гринь Л. Е., Короленко П. В., Федотов Н. Н. // Опт. и спектр. 1992. 73, № 5. С. 1007.
9. Короленко П. В., Новоселов А. Г., Степина С. А., Шарков В. Ф. // Квант. электроника. 1986. 13, № 12. С. 2546.
10. Васильев А. Б., Шульга А. Г., Короленко П. В. // Письма в ЖТФ. 1989. 32, № 22. С. 91.
11. Бабич В. М., Попов М. М. // Изв. вузов, Радиофизика. 1989. 32, № 12. С. 1447.

Поступила в редакцию
03.02.95

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 5

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.975

МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А. А. Кацнельсон, А. Э. Мороз, О. С. Трушин, В. С. Степанюк
(кафедра физики твердого тела)

Представлены результаты молекулярно-динамического моделирования роста пленок серебра и кобальта и кобальтовой подложке. Для описания межчастичных

взаимодействий использован обобщенный потенциал Леннарда—Джонса. Расчет показывает, что в случае гомоэпитаксии образуются плоские кластеры на поверхности в начальной стадии роста пленки. На примере гетероэпитаксии продемонстрировано, что кристаллографическая ориентация наносимого на подложку слоя отличается от ориентации подложки.

1. Введение

Изучение механизмов роста пленок в процессе напыления представляет большой интерес как для фундаментальной науки, так и для технологии. Значительный прогресс в области технологий, основанных на применении тонких пленок, обусловил развитие фундаментальных исследований зависимости структурных характеристик пленок от методов и режимов их напыления. Хотя к настоящему времени опубликовано немало экспериментальных работ, в которых исследуются различные физические свойства пленок в зависимости от технологических режимов напыления, теории их роста носят, как правило, феноменологический характер. Это связано со сложным характером взаимодействий в рассматриваемых системах, из-за которого приходится применять крайне простые модели для получения аналитического решения.

В данной ситуации вычислительный эксперимент, в котором эволюция моделируемой системы прослеживается с высоким пространственным и временным разрешением, становится связующим звеном между экспериментом и теорией. Метод молекулярной динамики (МД), основанный на численном интегрировании уравнений движения достаточно большого числа частиц, взаимодействующих по заданному закону, в настоящее время широко применяется для получения информации о механизмах роста тонких пленок. Необходимо, однако, заметить, что такие расчеты требуют значительных вычислительных ресурсов, что может накладывать определенные ограничения на размеры исследуемых систем и времена их эволюции.

Метод МД особенно широко использовался для моделирования роста полупроводниковых пленок. Например, он применялся авторами [1] для исследования процесса роста пленок кремния на подложке из кремния. В работе моделировался процесс молекулярно-лучевой эпитаксии. В качестве потенциала межчастичного взаимодействия был использован трехчастичный потенциал Стиллинджера—Вебера. Авторы интересовались влиянием температуры подложки на структуру растущей пленки. Было установлено, что при температуре, составляющей около $(1/8)$ температуры плавления T_m , происходил рост аморфных слоев кремния и имела место реконструкция поверхности 2×1 . При температуре около $(2/3)T_m$ слои пленки получались более упорядоченные и исчезал эффект реконструкции. Эти результаты находились в качественном согласии с экспериментальными данными.

В работе [2] была сделана попытка проследить за изменениями структуры пленки аморфного кремния при различных направлениях пучков падающих атомов. Авторы показали, что при использовании пучка, падающего на подложку Si (111) под углом 60° к нормали, происходит формирование так называемой «микростолбчатой» структуры. Этот процесс имеет несколько стадий. Сначала формируются плоские кристаллические островки, затем из них образуются трехмерные кластеры, которые при дальнейшем росте переходят в столбчатую структуру. В некоторых случаях в растущей аморфной пленке образовывались пустоты. Подобные пустоты были найдены в эксперименте при исследовании микроструктуры аморфных полупроводников. Значительно меньше имеется опубликованных работ, посвященных

изучению механизмов роста тонких пленок металлов на металлических подложках.

Цель настоящей работы — установление основных закономерностей процесса роста и структуры тонких пленок при гомо- и гетерозпитаксии. Для описания межчастичных взаимодействий использован обобщенный потенциал Леннарда—Джонса [3].

2. Метод

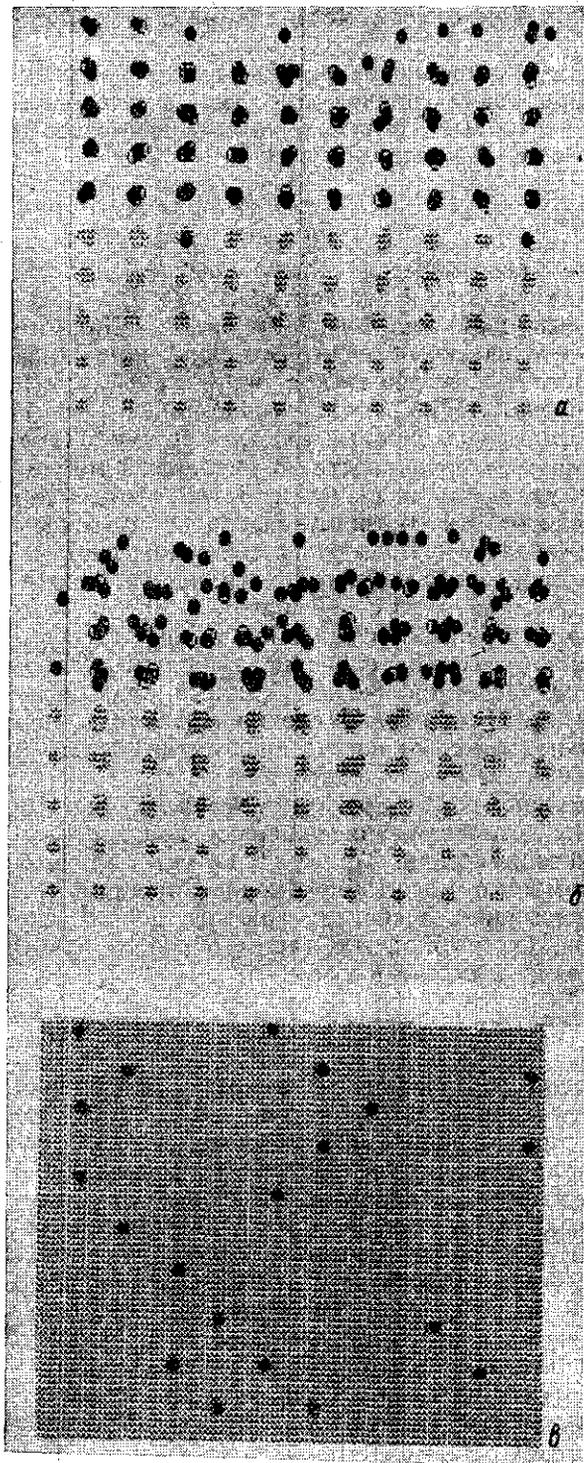
В представленной работе используется следующая МД-модель. В расчетной кубической ячейке создаются два статических и три динамических слоя атомов. Каждый слой состоит из 50 частиц. Динамические слои находятся над статическими и играют роль подложки. Мы рассматриваем поверхность г. ц. к. решетки с ориентацией (100). Периодические граничные условия (ПГУ) накладываются на расчетную ячейку параллельно плоскости поверхности. Система не имеет ПГУ в направлении, перпендикулярном к поверхности. В начальный момент атомы подложки находятся в узлах г. ц. к. решетки. Затем атомам динамических слоев задаются скорости в соответствии с распределением Максвелла при заданной температуре. Временная эволюция системы прослеживается путем интегрирования классических уравнений движения атомов по схеме с перешагиванием [4] с МД-шагом $2 \cdot 10^{-15}$ с. После релаксации атомных слоев подложки при заданной температуре начинается процесс вбрасывания атомов из случайно выбранных координат x и y на верхней грани расчетной ячейки. Каждый вбрасываемый в систему атом получает импульс в направлении нормали к подложке и в начальный момент находится от нее на расстоянии, большем радиуса обрыва парного потенциала взаимодействия.

Атомы, которые после столкновений с другими атомами пучка или подложки дрейфуют в сторону источника, уничтожаются при достижении ими верхней грани расчетной ячейки. Температура моделируемой системы контролируется с помощью масштабирования скоростей атомов подложки. Интервал вбрасывания в систему каждого нового атома составляет 100 МД-шагов. Он выбирается таким образом, чтобы исключить взаимодействия между атомами в пучке.

3. Результаты

Процесс гомозпитаксии мы исследовали на примере напыления атомов кобальта на подложку из кобальта. Система Co/Co (100) моделировалась при температурах подложки 300 и 800 К. Энергия падающих атомов соответствовала температуре 1500 К. На рис. 1, а и б представлены распределения атомов Co в расчетных ячейках при температурах 300 и 800 К в проекции на плоскости XOZ. Во всех случаях гомозпитаксии атомы, попадающие на подложку, формируют кристаллическую пленку. Ее структура аналогична структуре подложки, но тем менее упорядочена, чем более высока температура подложки. Эти данные в общем согласуются с результатами работы [5], в которой была сделана одна из первых попыток МД-моделирования эпитаксиального роста на примере идеальной леннард-джонсовской системы. Авторы [5] при различных температурах получали пленку, состоящую из хорошо упорядоченных слоев.

Нами была сделана попытка проследить за динамикой роста пленки в процессе напыления. Оказалось, что хотя каждый вновь вбрасываемый в систему атом имел случайно выбранные координаты x и



у на верхней грани расчетной ячейки, рост пленки происходил неравномерно. Атомы, попав на поверхность, мигрировали по ней и образовывали группировки, своеобразные поверхностные островки или кластеры. Эти группировки вряд ли можно связать с неравновесностью системы, их существование скорее всего может быть объяснено тем, что внутренняя энергия поверхностного слоя оказывается ниже, если атомы образуют в этой плоскости кластеры. На рис. 1, в представлена характерная картина верхнего слоя расчетной ячейки, на которой наблюдается его неравномерное заполнение. Последующее слияние кластеров приводило к образованию нового монослоя. Данное явление; очевидно, связано с обсуждаемым в последнем времени кластерным механизмом роста пленок [6], это показывает, что поверхностные кластеры образуются даже при случайном вбрасывании атомов на поверхность.

Рис. 1. Распределение атомов в поверхностных слоях при гомоэпитаксиальном росте Со-пленки (черные значки) на Со-подложке (серые): а — 15 200 временных шагов, 460 атомов в системе, температура подложки 300 К, проекция на плоскость XOZ ; б — 11 000 временных шагов, 413 атомов в системе, температура подложки 800 К, проекция на плоскость XOZ ; в — проекция верхнего слоя пленки Со на плоскость XYO , температура подложки 800 К

Далее нами был исследован процесс гетероэпитаксии на примере системы Ag/Co (100). Температура подложки кобальта в наших расчетах составляла 300 К. На рис. 2 представлены распределения атомов в верхнем слое Co и ближайшем к нему слое Ag. Видно, что координация атомов в серой и черной сетках неодинакова. Если атомы Co образуют г. ц. к. сетку, соответствующую поверхности (100), то атомы Ag, как правило, образуют плотноупакованную, но с локальными искажениями сетку, соответствующую скорее всего плоскости (111) г. ц. к. решетки. Таким образом, при гетероэпитаксиальном росте структура даже ближайшего к подложке слоя пленки может отличаться от структуры верхнего слоя подложки. Это связано с тем, что из-за различия в атомных радиусах Co и Ag одинаковыми являются удвоенный диаметр атомов Co и расстояние между атомами Ag, расположенными вдоль длинной диагонали 60-градусного ромба.

Для того чтобы подтвердить эти соображения, нами была построена двумерная парная корреляционная функция $g(r)$. Процедура расчета этой функции в нашей работе аналогична приведенной в [7]. Соответствующие данные для слоев, изображенных на рис. 2, показаны на рис. 3. Очевидно, что квадраты положений максимумов функции

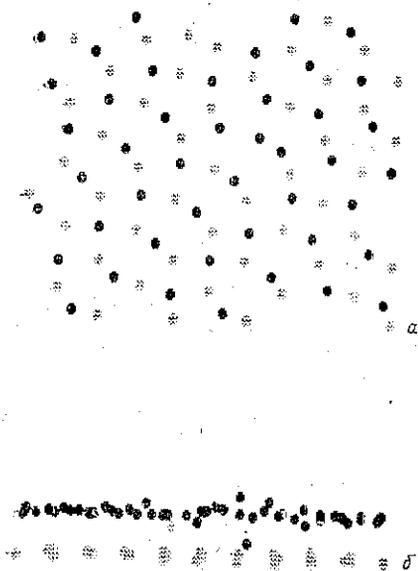


Рис. 2. Распределение атомов в верхнем слое Co-подложки (серые значки) и нижнем слое Ag-пленки (черные) на плоскости XYO (а) и XOZ (б); температура подложки 300 К

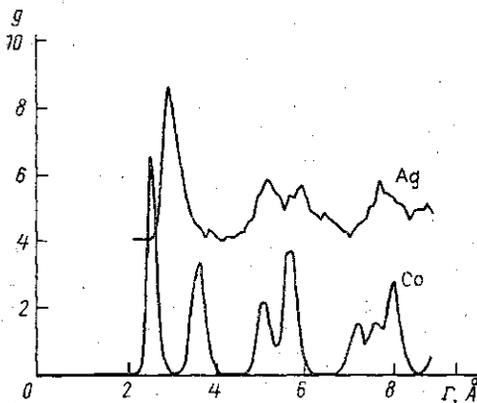


Рис. 3. Двумерные парные корреляционные функции $g(r)$, построенные для верхнего слоя Co и нижнего слоя Ag; температура подложки 300 К

$g(r)$ для слоя Co относятся как 1, 2, 4, 5, ..., что полностью соответствует г. ц. к. плоской (100) сетке. В то же время для $g(r)$, отвечающей плоскости, состоящей из атомов Ag, эти же отношения равны 1, 3, 4, ..., что сходится с расположением атомов на плоскости (111) г. ц. к. сетки. Характерно, что примерно одинаковым оказалось положение 3-го максимума $g(r)$ кобальта и 2-го максимума $g(r)$ серебра. Соответственно расстояние между ближайшими соседями в слое Co составило 2,5 Å ($r_{Co}=1,25$ Å [8]), а в слое Ag — 2,8—2,9 Å ($r_{Ag}=1,44$ Å [8]). Таким образом, при гетероэпитаксиальном росте кристаллографическая ориентация наносимого на подложку слоя меняется по сравнению

с ориентацией верхнего слоя подложки. Отметим, что этот наш результат качественно сходен с результатами моделирования монослоев Ag на подложке Ni или Cu, полученных недавно с помощью метода окруженного атома [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. Gawlinski E. T., Gunton J. D.//Phys. Rev. 1987. B36. P. 4774.
2. Luedtke W. D., Uzi Landman//Phys. Rev. 1989. B40. P. 11733.
3. Shu Zhen, Davies G. T.//Phys. Stat. Solidi (a). 1983. 78. P. 595.
4. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., 1987.
5. Schneider M., Rahman A., Schuller Ivan K.//Phys. Rev. Lett. 1985. 55. P. 604.
6. Holger Roder, Elmar Hahn, Harald Brune et al.//Nature. 1993. 366. P. 141.
7. Jia Zhenging, Yang Genging, Gheng Zhaonian et al.//J. Phys.: Condens. Matter. 1994. 6. P. 1083.
8. Вайнштейн Б. К. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. М., 1979.
9. Liqiu Yang, Talat S. Rahman, Black J. E.//Surf. Sci. 1992. 278. P. 407.

Поступила в редакцию
19.10.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 5

УДК 538.245

ОБ АНОМАЛИЯХ МАГНИТОСТРИКЦИИ СОЕДИНЕНИЯ CoFeCrO_4 С ФРУСТРИРОВАННОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРОЙ

А. Н. Горяга, Р. Р. Аннаев, А. Е. Богданов

(кафедра общей физики для естественных факультетов)

В интервале температур 4,2 К–350 К изучено поведение магнитострикции соединения CoFeCrO_4 , у которого, как ранее нами было обнаружено, магнитная структура носит фрустрированный характер. Найдено, что в данном соединении, в отличие от кобальтового феррита CoFe_2O_4 ($\lambda_{||} < 0$), продольная магнитострикция $\lambda_{||}$ имеет положительный знак и по абсолютной величине значительно меньше. Такое anomальное поведение магнитострикции $\lambda_{||}$ у CoFeCrO_4 , по-видимому, обусловлено тем, что в нем отсутствует техническое намагничивание, а рост намагниченности происходит вследствие увеличения проекций магнитных моментов отдельных спонтанно намагниченных областей на направление внешнего магнитного поля H .

Экспериментальные исследования магнитных свойств соединений, обладающих фрустрированной магнитной структурой, представляют большой научный интерес. Такие магнитные структуры могут возникать в соединениях, в которых имеется два и более сортов магнитных катионов и обменные взаимодействия между этими катионами различаются не только по знаку, но и по величине.

В соединениях с фрустрированной магнитной структурой магнитный порядок не пронизывает весь объем образца, а существует лишь в отдельных спонтанно намагниченных областях. В случае кластерного «спинового стекла» эти области малого объема образованы ближним магнитным порядком, в то время как в других фрустрированных магнитных структурах спонтанно намагниченные области достаточно велики и образованы дальним магнитным порядком. В зависимости от того, является ли в этих областях преобладающим ферро-, ферри- или антиферромагнитный порядок, эти магнитные структуры называются соответственно сперомагнитной, сперимагнитной или асперомагнитной.

Обычно у соединений с фрустрированной магнитной структурой