

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов

А.Г. Сыромятников, С.В. Колесников, А.М. Салецкий, А.Л. Клавсюк

Рассматривается актуальное состояние многообещающей области современной физики — изучения физических свойств металлических нанопроводов и атомных цепочек. Привлекательность одномерных наноструктур обусловлена как перспективностью их практического применения, так и возможностью проверки с их помощью различных теоретических моделей и подходов посредством сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными. Описаны экспериментальные условия, при которых металлические нанопровода формируются на поверхностях металлов и полупроводников. Особое внимание уделено теоретическим моделям, описывающим сценарий роста нанопроводов на различных поверхностях. Дан анализ основных экспериментально определяемых факторов, влияющих на распределение длин нанопроводов. Показано, что распределение длин нанопроводов на поверхности металлов и полупроводников зависит не только от внешних параметров, но и от времени их формирования. Рассмотрены магнитные свойства атомных цепочек конечной длины, расположенных на поверхностях металлических и полупроводниковых кристаллов. Показана корреляция между структурными, электронными и магнитными свойствами нанопроводов. Установлено влияние нанопроводов на электронные свойства поверхностей, на которых они формируются. Объяснена природа краевых состояний. Показано влияние длины нанопровода на электронные состояния его атомов. Обсуждается эффект Рашибы для металлических нанопроводов на поверхности полупроводников, представлен анализ влияния величины обменной энергии между атомами и энергии магнитной анизотропии на макроскопические характеристики нанопроводов, такие как критическая температура и время спонтанного перемагничивания.

Ключевые слова: атомные провода, металлические цепочки, квантовая проводимость, эффект Рашибы, наномagnetизм, спинтроника, краевые состояния, эпитаксиальный рост

PACS numbers: 05.10.Ln, **61.46** – w, 68.55.A – , **68.65** – k, 73.63.Rt, **75.75** – c DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.06.038789>

Содержание

1. Введение (705).
2. Формирование металлических атомных цепочек и проводов (706).
 - 2.1. Формирование атомных структур на вицинальной поверхности при однотемпературном режиме.
 - 2.2. Формирование атомных структур на вицинальной поверхности при двухтемпературном режиме.
 - 2.3. Формирование одномерных атомных структур на поверхности металлов (110) и полупроводников (001).

А.Г. Сыромятников^(1,2,a), С.В. Колесников^(1,b),
А.М. Салецкий⁽¹⁾, А.Л. Клавсюк^(1,c)

⁽¹⁾ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет,
Ленинские горы 1, стр. 2, 119991 Москва, Российская Федерация

⁽²⁾ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН,
ул. Косыгина 4, 119991 Москва, Российская Федерация

E-mail: ^(a) ag.syromyatnikov@physics.msu.ru,

^(b) kolesnikov@physics.msu.ru, ^(c) klavsyuk@physics.msu.ru

Статья поступила 10 мая 2020 г.,
после доработки 11 июня 2020 г.

3. Распределения длин атомных цепочек (711).
 - 3.1. Равновесное распределение длин атомных структур в модели одномерного решётчатого газа.
 - 3.2. Решение уравнений кинетического баланса.
 - 3.3. Анализ распределений длин атомных цепочек с использованием кинетического метода Монте-Карло.
 4. Структурные свойства атомных проводов (717).
 - 4.1. Определение структуры и химического состава атомных цепочек.
 - 4.2. Структурный фазовый переход в атомных цепочках кобальта на вицинальной поверхности меди.
 5. Квантовые эффекты в атомных цепочках (720).
 - 5.1. Плотность состояний двумерного электронного газа.
 - 5.2. Локализация поверхностных состояний в одиночных атомах, краевые состояния атомных цепочек на поверхности.
 - 5.3. Плотность состояний атомных цепочек.
 - 5.4. Эффект Рашибы.
 - 5.5. Магнитные свойства атомных проводов и цепочек.
 6. Заключение (734).
- Список литературы (735).

1. Введение

Создание структур с новыми физическими свойствами является одной из основных задач технологии, имеющей целью расширение пределов применимости ныне суще-

ствующих материалов. Ключевым её направлением является уменьшение размеров до тех пределов, при которых квантовые эффекты существенно влияют на электронные и магнитные свойства. Примером таких структур являются металлические атомные цепочки (два или более взаимодействующих друг с другом атомов, расположенных в линию) и провода (бесконечные атомные цепочки или цепочки такой длины, при которой краевыми эффектами можно пренебречь) на поверхности металлов, полупроводников и диэлектриков [1–25]. Поэтому в последнее время особое внимание уделяется изучению свойств металлических атомных цепочек и проводов. Обнаружение новых физических свойств в одномерных атомных структурах позволяет создавать новые устройства для электроники. К подобным свойствам можно отнести квантованную проводимость [26, 27], "краевые" электронные состояния [28], волны спиновой и электронной плотности [29], гигантский эффект Рашбы [30]. В связи с этим одной из наиболее актуальных задач современной физики является создание металлических атомных цепочек и проводов с контролируемыми свойствами.

Изучение процессов формирования одномерных атомных структур необходимо для того, чтобы иметь возможность контролировать и манипулировать их электронными и магнитными свойствами путём подбора соответствующих условий эксперимента. Несмотря на большое количество работ, посвящённых исследованию процессов роста одномерных структур, до сих пор не выработано общего подхода к решению данной проблемы. Поскольку формирование атомных одномерных структур и их свойств определяется сложным характером межатомного взаимодействия, исследования процессов формирования атомных цепочек и проводов вызывают трудности. Действенную помощь для детального описания таких систем оказывают теоретические методы, сопряжённые с компьютерным моделированием. Тем более что в последнее время с появлением мощных вычислительных комплексов был совершён колоссальный прогресс в компьютерном моделировании. Суперкомпьютеры позволяют перейти к сложным моделям в описании реального межатомного взаимодействия низкоразмерных систем, что даёт возможность проводить более глубокое исследование процессов самоорганизации одномерных структур.

Несмотря на прогресс в методах исследований одномерных структур, существует множество неразрешённых проблем. Одной из них является проблема анализа распределения длин одномерных атомных структур, формирующихся при эпитаксиальном росте. Среди множества теоретических моделей [31–37], предложенных для описания распределения длин одномерных атомных структур, нет ни одной, которая давала бы количественное совпадение с экспериментом [31]. Другой проблемой является установление структуры металлических атомных цепочек и проводов на поверхности полупроводников. Это связано с тем, что экспериментальные методики не позволяют определить химический состав атомных структур, а теоретические подходы не позволяют однозначно определить структуру цепочек и проводов, которые формируются в эксперименте. Немаловажным является изучение термодинамических свойств металлических атомных цепочек и проводов. Знание об их поведении с изменением температуры необходимо для конструирования устройств и приборов в будущем, так как оно

определяет границы применимости созданных структур. Лишь в последнее время появились работы, в которых используется кинетический метод Монте-Карло (КМК) для оценки времени существования атомных цепочек [38–40].

За последнее десятилетие спинтроника стала одним из наиболее перспективных направлений развития технологий. При этом одним из интереснейших вопросов является следующий: можно ли использовать атомные цепочки и провода для хранения информации? Интерес к использованию одномерных атомных структур в качестве элементов памяти связан, прежде всего, с тем, что их можно размещать на поверхности кристалла с большей плотностью. В связи с этим существует необходимость исследования магнитных и электронных свойств одномерных атомных структур. При переходе к атомным масштабам на первый план выходят квантовые свойства рассматриваемых объектов, поэтому очевидными являются трудности экспериментального изучения их магнитных и электронных свойств. Что касается теории, то, несмотря на отдельные успехи в изучении этих вопросов, в целом обсуждаемая область ещё далека от полного понимания природы и механизмов рассматриваемых явлений. Это связано, в частности, с необходимостью детального учёта разных типов взаимодействий, которые, в силу их нелокальности, весьма трудоёмки как для аналитической теории, так и для численного анализа. Поэтому в обзоре особое внимание уделяется теоретическим подходам при изучении электронных и магнитных свойств металлических цепочек и проводов.

В настоящем обзоре описываются структурные, электронные и магнитные свойства атомных цепочек и проводов. Обсуждаются основные теоретические модели, описывающие особенности формирования этих структур. На основе сравнения экспериментальных и теоретических результатов дан анализ и представлена оценка преимуществ и недостатков различных теоретических подходов к исследованию свойств атомных цепочек и проводов.

2. Формирование металлических атомных цепочек и проводов

В настоящее время создание атомных цепочек возможно с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) [1–3] и эпитаксиального выращивания. В качестве примера на рис. 1а представлены атомные цепочки нитрида меди, созданные с помощью СТМ. Поскольку манипуляция атомами при помощи СТМ требует больших усилий и временных затрат, создаваемые таким образом атомные структуры будут трудно воспроизводимы в промышленном масштабе. Поэтому самоорганизация атомов, эпитаксиально напылённых на поверхность, является на данный момент одним из основных способов формирования металлических атомных цепочек и проводов. Несмотря на то что эпитаксиальный рост одномерных структур исследуется уже на протяжении многих лет, только сейчас стала понятна роль многих атомных процессов в формировании подобных структур. Этому способствовало как развитие экспериментальных методик, так и появление мощных вычислительных комплексов, которые позволяют рассматривать сложные модели. Совокупность как теоретических, так и экспериментальных методов способствует более глубо-

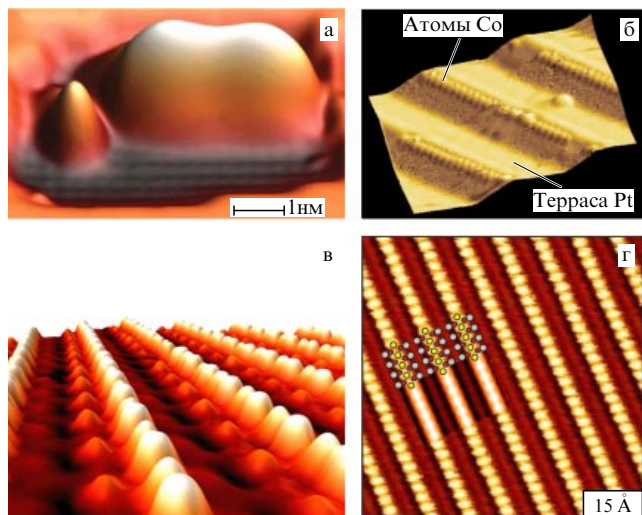


Рис. 1. СТМ-изображение различных одномерных атомных структур: (а) провода нитрида меди на поверхности $\text{Cu}(100)$ [1], (б) провода Co на поверхности $\text{Pt}(997)$ [9], (в) провода Pt на поверхности $\text{Ge}(001)$ [23], (г) провода оксида Co на поверхности $\text{Ir}(100)$ [12].

кому пониманию процессов самоорганизации и нахождению оптимальных условий для роста металлических атомных цепочек и проводов.

В последние годы было создано и исследовано большое количество эпитаксиальных систем, в которых формируются одномерные атомные цепочки и провода (рис. 1б–г). Это металлические вицинальные ступенчатые поверхности [4–9], поверхности металлов [10–13] и полупроводников [14–25], обладающие низкими индексами Миллера.

2.1. Формирование атомных структур на вицинальной поверхности при одготемпературном режиме

Любую поверхность можно считать вицинальной, поскольку даже самая тщательная подготовка поверхности монокристалла с низкими индексами Миллера оставляет на поверхности определённое количество ступеней. Ступени возникают из-за мозаичной структуры кристалла или из-за ограничений в совершенстве ориентации кристалла до и во время процессов его резки и полировки. Для металлических и полупроводниковых поверхностей среднее расстояние между ступенями может достигать 500 нм, а разброс расстояний между ступенями вокруг их среднего значения может привести к появлению на поверхности террас шириной в несколько микрометров. В дальнейшем мы будем рассматривать поверхности типа $(m, m, m+2)$ и $(m, m, m-2)$ с небольшими значениями индекса m , которые представляют собой ступенчатую поверхность с террасами (111), состоящими из m атомных рядов. Такие поверхности при малых значениях индекса m имеют узкие террасы, и для большинства металлов диффузионный барьер для прыжка атома по поверхности (111) равен нескольким десяткам миллиэлектронвольт [41–45]. При этом рост наноструктур на таких поверхностях будет происходить возле ступени, и их геометрия существенным образом будет зависеть от температуры, при которой они формируются.

В качестве примера на рис. 2 показаны наноструктуры кобальта, которые формируются на поверхности $\text{Pt}(997)$

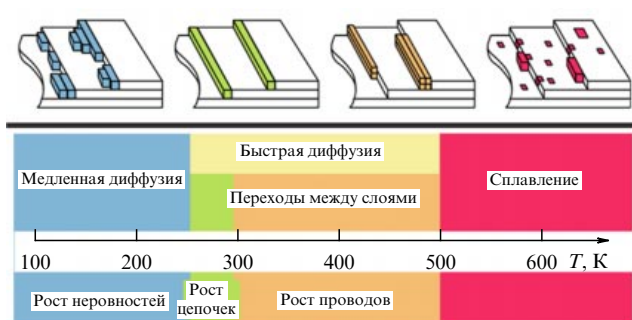


Рис. 2. Образование различных наноструктур Co на поверхности $\text{Pt}(997)$ при различных температурах подложки [5, 47].

при различных температурах. Поскольку диффузионный барьер для прыжка атома Co по террасе мал, то до напыления следующего атома Co успевает подойти к ступени. Вероятность отпрыгнуть от ступени для атомов Co мала, поскольку диффузионный барьер для этого события больше 1 эВ. При этом атомы Co случайным образом будут двигаться вдоль ступени. При встрече двух атомов Co возле ступени образуется димер, который впоследствии становится центром роста наноструктур. Количество центров роста и дальнейшая эволюция системы зависит от скорости напыления, степени покрытия, температуры и значения диффузионного барьера одиночного атома вдоль ступени. Таким образом, основным фактором, определяющим тип образующихся наноструктур, является скорость диффузии атомов Co вдоль края ступени. Так, при температуре ниже 250 К скорость диффузии вдоль края ступени мала, что приводит к росту неровностей возле неё. В интервале температур от 250 до 290 К атомы Co двигаются вдоль ступени достаточно интенсивно, вследствие чего формируются атомные цепочки и провода. При дальнейшем увеличении температуры активизируются диффузионные переходы между слоями, в результате вместо одноатомных цепочек формируются провода толщиной в несколько атомов. При температуре выше 500 К происходит погружение атомов Co в поверхность, т.е. происходит сплавление металлов. Как видно из рис. 2, атомные провода формируются лишь в узком интервале температур. Экспериментально было обнаружено, что для Cu на поверхности $\text{Pt}(997)$ нижняя граница этого интервала равна 175 К, а для Ag , Co и Fe — 250 К [46]. Верхняя граница ограничена комнатной температурой.

Другим важным параметром эпитаксиального роста наноструктур на поверхности является степень покрытия — отношение количества осаждённых атомов к количеству атомов, содержащихся в одном монослое (МС) поверхности. Рассмотрим влияние этого параметра на примере осаждения кобальта на вицинальную поверхность меди при комнатной температуре. При низком значении степени покрытия, порядка 0,1 МС, на поверхности наблюдаются два основных процесса: во-первых, границы террас декорируются островками кобальта, как с верхней, так и с нижней стороны ступени, в результате край террасы приобретает "рваную" форму. Во-вторых, островки из перемешанных атомов меди и кобальта располагаются непрерывно и нерегулярно вдоль края ступени [48–50], образуя структуру шириной 5 нм. Аналогичные одномерные наросты формируются и при осаждении

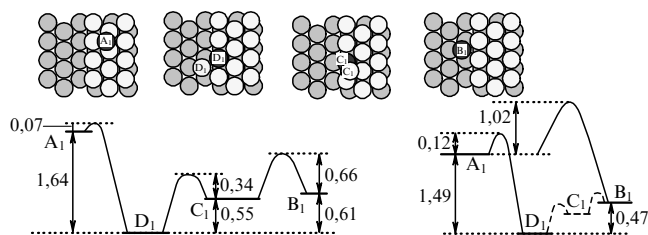


Рис. 3. Первая фаза формирования проволоки на краю медной ступени: вид сверху и энергетические диаграммы для железа и кобальта (слева и справа соответственно). Белые и серые круги отображают атомы меди на верхнем и следующем слое соответственно; чёрные — адатомы. Относительные энергии и энергии активации для переходов между состояниями даны в эВ и указаны рядом с вертикальными стрелками, их соединяющими [57].

дении железа на вицинальную поверхность меди [51, 52]. При повышении степени покрытия адатомы на поверхности террасы начинают образовывать двухслойные островки [53]: маленькие, имеющие неправильную форму [54], и большие (размером около 4 нм) с ярко выраженной треугольной формой. При дальнейшем увеличении степени покрытия размеры островков увеличиваются [49] и затем островки срастаются [55, 56].

Рассмотренные выше результаты экспериментальных работ показывают, что для Co/Cu(111) при постоянной температуре возможно формирование одномерных атомных структур, которые имеют вид наростов возле ступени. Подобное поведение характерно и при осаждении на вицинальную поверхность меди атомов железа [51, 52].

Механизм роста одномерных атомных металлических структур на вицинальной поверхности меди при однотемпературном режиме был предложен в работе [57]. Формирование одномерных атомных структур у края ступени состоит из следующих процессов: подход атома к чистой границе террасы (первая фаза) и подход атома к уже сформировавшейся в первой фазе атомной структуре (вторая фаза).

В первой фазе атомы железа и кобальта обладают схожим поведением (рис. 3). Поэтому в качестве примера рассмотрим поведение в этой фазе атома железа. В первой фазе адатом железа предпочитает занимать ГЦК-узел (ГЦК — гранецентрированная кубическая решётка) на поверхности независимо от своего расположения на ней (в середине террасы либо на её краю рядом со ступенью). Диффузионный барьер для прыжка адатома на террасе равен 0,025 эВ, поэтому если терраса узкая, то адатом довольно быстро оказывается возле ступени. На краю ступени, при движении с верхней её части, механизм движения адатома гораздо сложнее. Вместо того чтобы перескочить на нижнюю террасу с энергетическим барьером 1 эВ (рис. 3, $A_1 \rightarrow B_1$), адатом железа погружается в ступень путём обмена с атомом меди (рис. 3, $A_1 \rightarrow D_1$), где энергетический барьер всего лишь 0,07 эВ. Далее вытесненный атом меди предпочитает остаться внизу ступени, соседним по отношению к адатому железа.

Рассмотрим адатом, который находится возле ступени на нижней террасе. В этом случае адатом железа сначала должен будет выдвинуть атом меди из ступени (рис. 3, $B_1 \rightarrow C_1$), преодолев барьер, равный 0,66 эВ. После этого атом меди прыгнет на террасу вниз, пре-

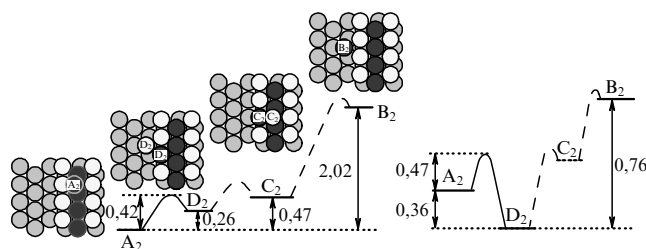


Рис. 4. Вторая фаза формирования проволоки на краю медной ступени: вид сверху и энергетические диаграммы для железа и кобальта (слева и справа соответственно). Белые и серые круги отображают атомы меди на верхнем и следующем слое соответственно; чёрные — адатомы. Относительные энергии и энергии активации для переходов между состояниями даны в эВ и указаны рядом с вертикальными стрелками, их соединяющими [57].

одолев энергетический барьер 0,34 эВ (рис. 3, $C_1 \rightarrow D_1$). Таким образом, конечная конфигурация для обоих случаев будет одна и та же независимо от того, откуда, сверху или снизу, к краю ступени придёт адатом железа.

При приближении второго адатома железа к краю террасы, уже содержащему погружённый атом железа (рис. 4), он, наиболее вероятно, продолжит формирование погружённой структуры длиной в два атома. Последующие адатомы железа также будут погружаться рядом, что приведёт к появлению погружённого ряда атомов железа на краю ступени медной поверхности.

При приближении адатома железа к границе ступени, уже содержащей ряд атомов железа, ему энергетически выгодно остаться сверху над погружённым возле ступени атомным проводом. В результате дополнительное расположение адатомов железа на вицинальной поверхности меди приведёт к появлению на верхней границе ступени атомного провода из железа. В дальнейшем происходит увеличение ширины провода [57, 58].

Поскольку атомы железа и кобальта одинаково взаимодействуют с медной поверхностью, то процессы обмена для атомов кобальта будут происходить аналогично (см. рис. 3). Расстояние между ближайшими соседями в кристалле меди $d_{Cu-Cu} = 2,56$ Å, тогда как для объёмноцентрированной (ОЦК) решётки железа оно меньше и равно $d_{Fe-Fe} = 2,48$ Å. Для кобальта расстояние между ближайшими соседями $d_{Co-Co} = 2,51$ Å, что позволяет погружённой проволоке кобальта встраиваться в поверхность ГЦК-решётки медной подложки даже лучше, чем железной. При этом, если первая фаза (образование атомного провода) проходит одинаково как для атомов железа, так и для атомов кобальта, то во второй фазе проявляются существенные различия, поскольку кристалл кобальта имеет гексагональную структуру и его поверхность (0001) имеет такой же вид, что и поверхность меди (111). Кроме того, расстояния между ближайшими соседями у них примерно равные. Поэтому атомы кобальта погружаются в поверхность, увеличивая ширину погружённой цепочки кобальта в два раза.

Как показано на рис. 4, при движении адатома снизу ступени его конечное положение лежит энергетически ниже начального, что делает возможным его погружение в ступень путём обмена с её атомами. Если атомы кобальта движутся к краю террасы сверху, то они будут погружаться в ступень путём вытеснения атомов меди, что приведёт к увеличению ширины погружённых проводов кобальта [57, 58].

2.2. Формирование атомных структур на вицинальной поверхности при двухтемпературном режиме

Эпитаксиальный рост тонких металлических плёнок и наноструктур на поверхности металлов представляет интерес для исследовательских групп уже более полувека; так, рост кобальта на поверхности меди впервые описан в 1936 г. [59]. С тех пор исследования системы Co/Cu(111) интенсивно проводились и проводятся различными научными группами [8, 48, 49, 52–56, 60, 61]. Несмотря на это, долгое время считалось невозможным создать атомные цепочки Co и Fe на вицинальной поверхности меди посредством эпитаксиального роста. И действительно, как было показано экспериментально [48, 49, 52–56, 60] и теоретически [37, 57, 58, 62], формирование атомных цепочек Co и Fe на вицинальной поверхности меди при одностемпературном режиме невозможно. Но в то же время формирование атомных цепочек Co было продемонстрировано при двухтемпературном режиме [8, 61]. При таком режиме вначале проводили напыление атомов Co на вицинальную поверхность Cu(775) в количестве 0,02 МС со скоростью 0,01 МС мин⁻¹ при 165 К. После этого образец некоторое время нагревался до комнатной температуры.

Механизм роста одномерных атомных металлических структур на вицинальной поверхности меди при двухтемпературном режиме следующий [58, 62]. После напыления на поверхность адатомы Co случайно блуждают по террасе, преодолевая при этом барьер 40 мэВ, пока не достигнут края ступени. На чистой поверхности адатом, приближающийся к краю террасы, должен преодолеть его отталкивающий барьер. Отталкивающий барьер для адатома Co на верхней террасе (136 мэВ) значительно выше, чем на нижней (69 мэВ). Это хорошо видно из рис. 5а, на котором изображена карта потенциальной энергии для адатома Co на вицинальной поверхности Cu(775). По этой причине при температурах в диапазоне 150–170 К адатомы наиболее вероятно приблизятся к ступени с нижней стороны террасы. При этом лишь немногие (два-три из тысячи) адатомы подходят к краю ступени сверху [63]. Подобное различие обусловливается перераспределением заряда на краю ступени [63, 64] и приводит к тому, что взаимодействие между адатомом и ступенью на верхней и нижней террасе разное. Так, например, уменьшение электронной плотности на краю верхней террасы снижает экранирование прямого кулоновского взаимодействия между адатомом Co и атомами края ступени и, как следствие, увеличивает отталкивающий барьер. В результате отталкивание между адатомами и краем ступени может значительно уменьшить диффузию адатомов к нему.

При детальном анализе взаимодействия адатома Co с вицинальной поверхностью Cu(111) был обнаружен любопытный эффект [58, 62]. Цепочка, расположенная у края террасы, увеличивает энергию взаимодействия адатома с поверхностью в середине нижней террасы (рис. 5б) и, наоборот, уменьшает её в середине верхней террасы (рис. 5в). Таким образом, цепочка кобальта останавливает диффузию адатомов на нижней террасе и, наоборот, разрешает её на верхней, выступая своеобразным "наносемафором" [62] для адатомов, движущихся вдоль террасы. В этом случае с большей вероятностью адатомы Co будут приближаться к ступени с нижней террасы и в местах наименьшего скопления

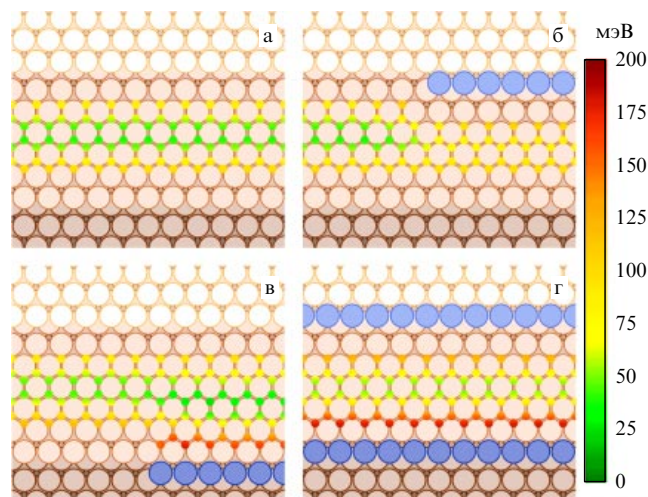


Рис. 5. (В цвете онлайн.) Карта потенциальной энергии для адатома Co на вицинальной поверхности Cu(775). (а) На поверхности присутствуют атомные цепочки кобальта. (б, г) На поверхности присутствуют атомные цепочки кобальта на различных террасах. (в) Чистая поверхность [37].

адатомов Co. Немногочисленные адатомы Co, которые приближаются со стороны верхней террасы, могут внедряться в край ступени посредством флуктуаций её атомов, определяемых диффузией вакансий или через обменный механизм на краях ступеней [65]. Потенциальный барьер для такого события составляет 250 мэВ. Два адатома при встрече на террасе могут образовать димер. Вероятность этого процесса уменьшается с ростом температуры и уменьшением ширины террасы. Первый этап заканчивается, когда большинство адатомов подойдут к краю ступени.

На втором этапе продолжается формирование атомных цепочек на вицинальной поверхности за счёт коалесценции возле ступени адатомов и димеров. Поскольку диффузионный барьер для прыжка адатома Co возле ступени 300 мэВ на порядок выше, чем на террасе, то для увеличения скорости диффузии повышают температуру [8, 46]. Длительность второго этапа зависит от соотношения энергии связи в атомных цепочках и температуры. Чем меньше это соотношение, тем быстрее происходит объединение атомных цепочек и тем быстрее будет достигнуто равновесное состояние. Например, система из атомных цепочек серебра на поверхности Pt(997) с энергией связи 60 мэВ при 160 К приходит к термодинамически равновесному состоянию за несколько секунд [38]. Если температуру понизить, то время, за которое система придёт в термодинамическое равновесие, значительно увеличится. Как видно из рис. 6, при 100 К система Ag/Pt(997) не успевает прийти в термодинамическое равновесие даже за несколько дней. Стоит отметить, что при температуре ниже 105 К атомы серебра возле ступени становятся менее подвижными, поэтому атомные цепочки при низких температурах за время проведения эксперимента не успевают прийти в равновесное состояние. Для атомных цепочек кобальта на поверхности Cu(775) при температурах выше 160 К время релаксации значительно меньше времени проведения эксперимента [39, 40, 66]. Второй этап заканчивается формированием атомных цепочек и проводов разной длины.

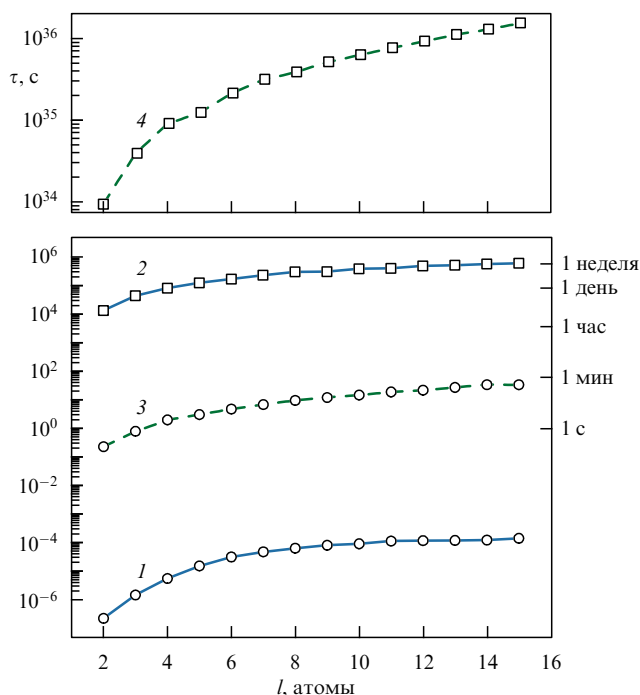


Рис. 6. Среднее время жизни цепочки в зависимости от её длины в системах: Ag/Pt(997) (кривая 1 при 160 К, кривая 2 при 100 К) и Co/Cu(775) (кривая 3 при 160 К, кривая 4 при 100 К) [38].

2.3. Формирование одномерных атомных структур на поверхности металлов (110) и полупроводников (001)

Кроме природы материалов примеси и подложки, температуры, скорости напыления, степени покрытия, важным фактором, определяющим характер роста наноструктур, является симметрия поверхности подложки. Рассмотрим такое влияние на рост одномерных структур на примере нереконструированной поверхности металлов ГЦК(110) [11, 51, 67, 68] и реконструированной поверхности полупроводников типа алмаз (001) [19, 69–73]. На подобных поверхностях, исходя из соображений симметрии, возможен рост одномерных атомных структур в процессе эпитаксии.

Нереконструированная поверхность ГЦК(110) металлов состоит из плотноупакованных рядов атомов, находящихся друг от друга на расстоянии вторых соседей (рис. 7а). Поэтому диффузия атомов на ней происходит преимущественно вдоль этих рядов, т.е. вдоль кристаллографического направления $[1\bar{1}0]$, и незначительно в перпендикулярном направлении $[001]$, так как активационные барьеры для диффузии в этих направлениях существенно отличаются для большинства металлов [43]. Например, диффузионные барьеры для Cu/Cu(110) вдоль $[1\bar{1}0]$ и $[001]$ равны 241 и 1020 мэВ соответственно [43]. Другим примером является реконструированная поверхность кремния и германия $c(4 \times 2)$ и $p(2 \times 2)$ типа алмаз (001), состоящая из рядов поверхностных димеров [74, 76], расположенных через ряд, как показано на рис. 7б. Как и в случае поверхности ГЦК(110), диффузия адатомов также будет происходить преимущественно в одном направлении. Возможность формирования в процессе эпитаксии одномерных атомных структур на поверхности металлов ГЦК(110) [11, 51, 67, 68] и на реконструированной поверхности полупроводников типа

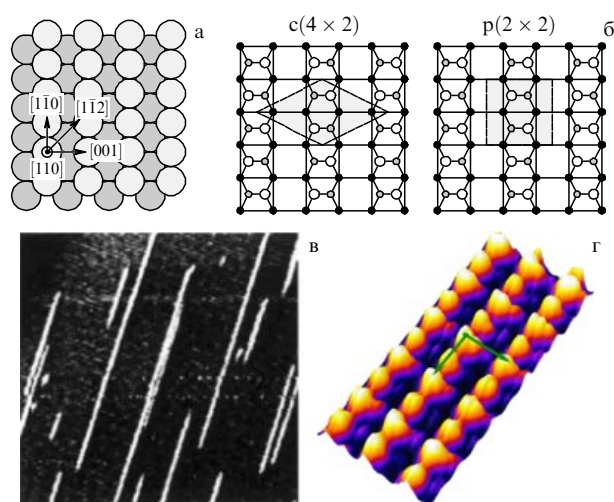


Рис. 7. (а) Вид поверхности ГЦК(110) и три возможных направления для диффузии адатомов [43]. (б) Реконструированная поверхность $c(4 \times 2)$ и $p(2 \times 2)$ типа алмаз (001) [74]. (в) СТМ-изображение атомных проводов Cu на поверхности Pd(110) [67]. (г) СТМ-изображение атомных проводов Ir на поверхности Si(001) [75].

алмаз (001) [14–25, 75] подтверждается экспериментально. На рисунке 7в, г показаны СТМ-изображения атомных проводов для Cu/Pd(110) [67] и Ir/Si(001) [75].

Помимо анизотропии диффузионных барьеров одиночных атомов, на рассматриваемых поверхностях существует анизотропия энергии связи. При напылении до 0,10 МС именно она, наряду с температурой, степенью покрытия и скоростью напыления атомов, определяет условия формирования атомных проводов [77–81]. Рассмотрим, как отношение степени покрытия θ к скорости напыления атомов F влияет на формирование одномерных структур на поверхности (110). При малом значении соотношения θ/F мобильность атомов низкая. Это связано с тем, что временной интервал между появлениями двух атомов очень мал и, как следствие, за короткий промежуток времени атом успевает лишь достичь другого атома или дефекта. Таким образом, на первом этапе формируется большое количество центров роста в виде димеров. Далее происходит формирование только коротких цепочек длиной два-три атома и шириной один-два атома. Стоит отметить, что, в отличие от поверхностей металлов (001) и (111), на поверхности (110) невозможен рост дендритов. Атомные цепочки являются кинетически стабилизированными структурами до тех пор, пока энергии недостаточно для разрыва связи крайнего атома с цепочкой. При увеличении соотношения θ/F количество центров роста уменьшается и имеет место самоорганизация атомных цепочек. Дальнейшее увеличение соотношения θ/F приводит к уширению атомных цепочек и формированию прямоугольных островков.

Рассмотрим механизмы влияния анизотропии энергии связи на форму самоорганизующихся структур. Пусть E_1 и E_2 — значения энергий связи двух атомов на поверхности, расположенных вдоль взаимно перпендикулярных направлений. Вследствие анизотропии поверхности (рис. 7а или б) межатомное расстояние между двумя атомами на поверхности вдоль одного направления меньше, чем в перпендикулярном, и, как следствие,

$E_1 \gg E_2$. В результате при небольшом количестве атомов N энергетически стабильной конфигурацией является линейная атомная цепочка. Если длина атомной цепочки достигает критической длины N_{crit} (число атомов), то энергетически более выгодным становится формирование второго ряда атомов. Для определения критической длины N_{crit} рассмотрим две атомные структуры: цепочку длиной $2N_{\text{crit}}$ и островок длиной N_{crit} и шириной в два атома. Энергия связи атомной цепочки $(2N_{\text{crit}} - 1)E_1$, а островка — $(2N_{\text{crit}} - 2)E_1 + N_{\text{crit}}E_2$. Приравнявая два этих значения, можно оценить критическую длину атомной цепочки $N_{\text{crit}} = E_1/E_2$. Например, для Cu/Cu(110) значения $E_1 = 0,3$ эВ и $E_2 = 0,03$ эВ [78], а $N_{\text{crit}} = 10$. В результате при малой концентрации будут формироваться атомные цепочки длиной до 10 атомов, а при большой концентрации будут формироваться прямоугольные вытянутые островки.

3. Распределения длин атомных цепочек

Одномерные атомные структуры привлекательны для создания новых современных электронных устройств. При этом для их применения в электронных устройствах желательно, чтобы они были одинаковой длины и обладали хорошей упорядоченностью. Поэтому одномерные структуры и их распределения по размерам исследуются как экспериментально, так и теоретически. Чаще всего экспериментальные исследования распределения длин атомных цепочек изучают при низких температурах с помощью СТМ [8, 20, 31]. Теоретические исследования и анализ распределения длин одномерных атомных структур проводят для систем, формирующихся при эпитаксиальном росте. В настоящее время выделяют три основных типа распределений длин цепочек (рис. 8). В первом из них имеется максимальное значение для одного структурного элемента и с ростом длины одномерной структуры функция распределения убывает. На рисунке 8а представлен такой тип распределения, наблюдаемый для цепочек $\text{Co}_{0,33}\text{Ni}_{0,67}\text{O}_2/\text{Ir}(001)$. Второй тип распределений обладает одним ярко выраженным максимумом (рис. 8б). Третий тип распределений характеризуется двумя или более максимумами, при этом высота последующих максимумов значительно уменьшается. На рисунке 8в в качестве примера показано распределение для цепочек $\text{Ir}/\text{Ge}(001)$.

Моделирование процессов роста атомных цепочек и проводов, а также исследование влияния внешних факторов на их распределения по длинам имеют первостепенное значение как для понимания физических свойств необратимых систем, далёких от равновесия, так и для установления возможности управления морфологией образующихся структур. Существуют три подхода к теоретическому анализу распределения длин атомных цепочек и проводов. В первом подходе в рамках термодинамики с использованием одномерной модели решёточного газа получают аналитическое выражение для функции распределения длин одномерных структур [31, 32]. Основой второго подхода является решение уравнений кинетического баланса, аналитическим решением которых являются скейлинг-функции [82]. И третий подход основан на применении кинетического метода Монте-Карло [37–39, 83–85]. Однако в последнее время наиболее часто для анализа распределений длин одномерных структур используют комбинацию сразу двух подходов. В частно-

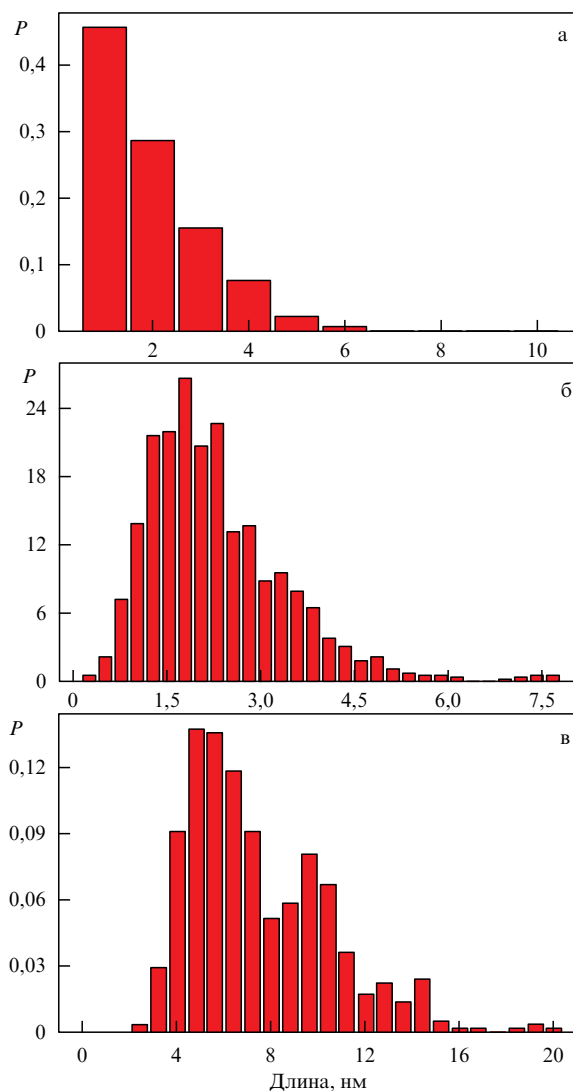


Рис. 8. Три характерных распределения длин атомных цепочек: (а) $\text{Co}_{0,33}\text{Ni}_{0,67}\text{O}_2/\text{Ir}(001)$ [12], (б) $\text{Ag}/\text{Pt}(997)$ [31], (в) $\text{Ir}/\text{Ge}(001)$ [20].

сти, решают уравнения кинетического баланса и далее сравнивают решение с результатами моделирования кинетическим методом Монте-Карло [33, 35, 86–91]. В рамках перечисленных подходов было получено много важных и интересных результатов, которые иногда противоречат друг другу. Далее приведено подробное описание применения перечисленных подходов при теоретическом исследовании распределения для атомных цепочек и проводов.

3.1. Равновесное распределение длин атомных структур в модели одномерного решёточного газа

Для получения равновесной функции распределения длин одномерных атомных структур рассмотрим модель одномерного решёточного газа [31, 32]. Пусть ряд, вдоль которого могут располагаться атомы, состоит из n узлов. Каждый из n узлов может быть либо занятым, либо свободным. Ограничимся взаимодействием только соседних атомов. Атомная цепочка в данной модели — это последовательность занятых узлов, с обоих концов ограниченная незанятыми. Задачу получения равновесной функции распределения можно решить в рамках

канонического ансамбля, т.е. число занятых узлов n_1 постоянно.

Для начала найдём количество атомных цепочек. Статистическая сумма системы может быть записана как [32]

$$Z = \sum_q \frac{n}{q} g_1 g_2 \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где g_1 и g_2 — факторы вырождения, q — число цепочек, связанное с энергией выражением

$$E = -\epsilon(n_1 - q), \quad (2)$$

ϵ — энергия связи.

Суммирование в выражении (1) проводится по всем возможным значениям q . Знак минус перед правой частью в выражении (2) означает, что соседние атомы при положительной ϵ притягиваются. Фактор g_1 равен числу способов расположить n_1 занятых узлов в q цепочках,

$$g_1 = \frac{(n_1 - 1)!}{(n_1 - q)!(q - 1)!}, \quad (3)$$

а g_2 — числу способов разместить $n_0 = n - n_1$ незанятых узлов в q пустых пространствах между цепочками,

$$g_2 = \frac{(n_0 - 1)!}{(n_0 - q)!(q - 1)!}. \quad (4)$$

Множитель n в выражении (1) отражает количество возможных конфигураций, а $1/q$ вводится для коррекции "лишних" конфигураций, получающихся в связи с периодическими граничными условиями. В зависимости от того, какой из q кластеров окажется "первым", можно разделить набор $ng_1 g_2$ конфигураций на q поднаборов, которые идентичны.

Для определения q используем асимптотический метод, в котором статистическая сумма заменяется её наибольшим слагаемым. Решая получившееся уравнение в термодинамическом пределе $n \rightarrow \infty$, получаем выражение для количества цепочек

$$q = \frac{\sqrt{n^2 + 4n_0 n_1 (\exp(\epsilon/k_B T) - 1)} - n}{2(\exp(\epsilon/k_B T) - 1)}. \quad (5)$$

Зная количество цепочек и температуру системы, определим энергию связи ϵ :

$$\epsilon = k_B T \ln \frac{(n_1 - q)(n - n_1 - q)}{q^2}. \quad (6)$$

Для установления функции распределения длин цепочек перепишем статистическую сумму в других переменных. Обозначим как q_l число цепочек длины l . Тогда каждый набор цепочек $\{q_k\}$ должен удовлетворять требованиям

$$n_1 = \sum_{k=1}^{\infty} k q_k, \quad q = \sum_{k=1}^{\infty} q_k. \quad (7)$$

Подставляя их в (2), получаем выражение для полной энергии набора цепочек $\{q_k\}$

$$E = -\epsilon \sum_{k=1}^{\infty} (k - 1) q_k. \quad (8)$$

Теперь определим фактор вырождения для набора $\{q_k\}$. Предположим сначала, что цепочки имеют разные длины. С учётом периодических граничных условий есть n способов выбрать положение первого кластера. По определению, каждая цепочка ограничивается двумя незанятыми узлами, что оставляет $n_0 - 1 = n - n_1 - 1$ позиций для оставшихся $q - 1$ цепочек. Имеется $(n_0 - 1)!(n_0 - q)!$ возможностей расположить эти цепочки. Однако, так как все цепочки одинаковой длины неразличимы, необходимо ввести поправку на число перемещений внутри каждой группы цепочек длины k . Это позволяет записать фактор вырождения для набора цепочек $\{q_k\}$ как

$$g_3 = \frac{n(\sum_{k=1}^{\infty} k q_k - 1)!}{(n - \sum_{k=1}^{\infty} (k + 1) q_k)! \prod_{k=1}^{\infty} q_k!}, \quad (9)$$

а статистическую сумму как

$$Z = \sum_{\{q_k\}} g_3 \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), \quad (10)$$

где суммирование проводится по всем наборам кластеров, удовлетворяющим условиям (7). Для определения числа цепочек длины l используем метод Лагранжа для нахождения экстремума натурального логарифма статистической суммы. Таким образом, можно записать

$$\frac{\partial}{\partial q_l} \left[\ln g_3(\{q_k\}) - \frac{E(\{q_k\})}{k_B T} + \lambda_1 \left(n_1 - \sum_{k=1}^{\infty} k q_k \right) + \lambda_2 \left(q - \sum_{k=1}^{\infty} q_k \right) \right] = 0, \quad (11)$$

где выражение в квадратных скобках является функцией Лагранжа, составленной из (10) и уравнений связи (7), а λ_1 и λ_2 — множители Лагранжа. Используя выражения (8) и (9), систему (11) можно переписать в виде

$$q_l = S_1^l S_2, \quad (12)$$

где

$$S_1 = \frac{n - n_1 - q}{n - n_1 - 1} \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T}\right) \exp(-\lambda_1) \quad (13)$$

и

$$S_2 = (n - n_1 - q) \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T}\right) \exp(-\lambda_2) \quad (14)$$

являются независимыми от l константами. Подставляя (12) в выражения (7) и решая их для S_1 и S_2 , получаем

$$S_1 = 1 - \frac{q}{n_1}, \quad S_2 = \frac{q^2}{n_1 - q}. \quad (15)$$

С учётом этого выражение (12) для распределения размеров цепочек будет иметь вид

$$q_l = \frac{q^2}{n_1} \left(1 - \frac{q}{n_1}\right)^{l-1}. \quad (16)$$

Деля уравнение (16) на полное количество цепочек q , окончательно получаем функцию распределения

$$F(l) = \frac{q}{n_1} \left(1 - \frac{q}{n_1}\right)^{l-1}. \quad (17)$$

Функция распределения длин цепочек (17) хорошо описывает первый тип распределений, показанный на рис. 8, и плохо описывает остальные типы распределений. Было сделано предположение, что модель одномерного решётчного газа не учитывает сильную деформацию коротких цепочек [31] (однако, как будет показано ниже, это не так). Несмотря на это, модель одномерного решётчного газа используют для определения энергии связи ϵ . Экспериментальное распределение длин атомных цепочек аппроксимируют теоретической функцией распределения (17) и определяют количество цепочек q . Далее используют (6) для определения энергии связи в атомных цепочках [8, 31]. При таком подходе значения энергии связи для некоторых систем значительно отличаются от значений, рассчитанных в рамках теории функционала плотности. Например, для Co/Cu(775) энергия связи составляет 0,13 эВ [8], в то время как теория функционала плотности даёт 0,56 эВ [8, 31]. Таким образом, модель одномерного решётчного газа описывает не все одномерные атомные структуры, что вызывает необходимость в других подходах для анализа распределений длин атомных одномерных структур.

3.2. Решение уравнений кинетического баланса

Другим подходом к анализу распределения длин атомных одномерных структур является решение уравнений кинетического баланса с использованием скейлинг-функций. Такой подход — один из лучших при исследовании формирования атомных структур на стадии, предшествующей их коалесценции [92–95]. Одним из наиболее интересных свойств, которыми обладают такие распределения, является так называемое свойство масштабирования, или скейлинга [92–96].

Рост одномерных островков (атомных цепочек и проводов) на поверхности можно разделить на два этапа: переходный и устойчивый. На первом этапе плотность одиночных адатомов N_1 увеличивается за счёт напыления новых атомов, в то время как на втором этапе она компенсируется за счёт присоединения адатомов к островкам. В переходном режиме плотность одиночных адатомов возрастает как $N_1 \approx Ft$, что приводит к появлению островков, расположенных на некотором расстоянии друг от друга (рис. 9а). Островки окружены зонами истощения, поэтому число одиночных адатомов N_1 уменьшается благодаря процессу присоединения их к островкам в этих зонах. Радиусы зон истощения увеличиваются со временем пропорционально $\sqrt{\tau}$, где τ — время с момента начала нуклеации (рис. 9б). Со временем зоны истощения перекрываются и покрывают собой всю площадь поверхности. В этот момент зоны истощения превращаются в зоны захвата, которые окружают каждый сформировавшийся островок (рис. 9в). В последующем устойчивом режиме большинство напыляемых атомов теперь присоединяется к островкам, причём в основном к находящимся в центре соответствующей зоны захвата (рис. 9г). Таким образом, параметры зон захвата позволяют оценить скорость роста островков [97–99].

Рассмотрим случай, в котором островки являются неподвижными. Для простоты введём критический размер островка i , по достижении которого он становится стабильным, т.е. от островка, состоящего из $i + 1$ атомов или более, атом оторваться не может. Плотность стабильных островков равна $N_{\text{isl}} = \sum_{s>i} N_s$, где N_s — плотность островков, состоящих из s атомов. Введём

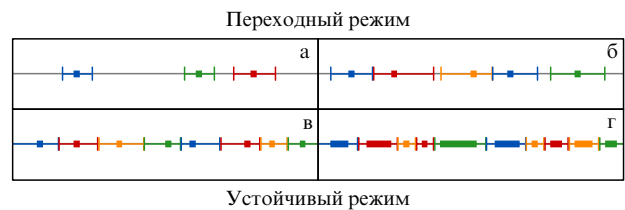


Рис. 9. (В цвете онлайн.) Схематическое изображение зон истощения (тонкие цветные линии) вокруг только что образовавшихся одномерных островков (толстые линии того же цвета) в переходном режиме (а), их рост (б), перекрытие (в) и превращение в зоны захвата в устойчивом режиме (г). Разными цветами обозначаются разные центры роста.

параметр покрытия поверхности $\Theta = \sum_{s \geq i} s N_s = Ft$, где t — время напыления, F — скорость напыления атомов. Рассмотрим уравнения кинетического баланса для формирования островков средней плотности. Скорость нуклеации даётся выражением $K_{\text{nuc}} = \sigma_i h N_1 N_i$ (здесь h — собственная частота прыжков адатома, σ_i — коэффициент захвата, описывающий вероятность захвата блуждающих адатомов нестабильными островками размера i , N_1 — плотность одиночных атомов). Для упрощения рассмотрения не будем учитывать возможность напыления адатома сверху или вплотную к островку. Скорость агрегации (захвата адатомов островками) равна $K_{\text{agg}} = \langle \sigma \rangle h N_1 N_{\text{isl}}$, где $\langle \sigma \rangle$ — средний коэффициент захвата для стабильных островков. Тогда уравнения кинетического баланса для средних плотностей адатомов и островков будут иметь вид [100–102]

$$\frac{dN_1}{dt} \approx F(1 - \Theta) - (i + 1)K_{\text{nuc}} - K_{\text{agg}}, \quad (18)$$

$$\frac{dN_{\text{isl}}}{dt} \approx K_{\text{nuc}}, \quad (19)$$

$$N_i \approx c_i \exp(-\beta E_i) (N_1)^i, \quad (20)$$

где выражение (20) описывает плотность критических кластеров [103], в котором c_i отражает число состояний критических кластеров с минимальной энергией $E_i < 0$, $\beta = 1/k_B T$. Интегрирование данной системы даёт два различных режима: переходный и устойчивый. Как было качественно показано выше, в переходном режиме $(d/dt)N_1 \approx F$, что даёт $N_1 \approx Ft = \Theta$, а в устойчивом $(d/dt)N_1 \approx F(1 - \Theta) - K_{\text{agg}} \approx 0$ и $N_1 \approx F(1 - \Theta)/(\langle \sigma \rangle h N_{\text{isl}}) \approx F/(\langle \sigma \rangle h N_{\text{isl}})$. Переход из одного режима в другой происходит при $\Theta^* \sim \exp[\beta E_i/(i + 3)] (h/F)^{-2/(i+3)}$.

Предполагая, что коэффициенты захвата σ_i не зависят от Θ , можно показать [100–102, 104–106], что

$$N_{\text{isl}} \sim \Theta^{i+2} \exp(-\beta E_i) \left(\frac{h}{F}\right) \quad (21)$$

в начальном режиме,

$$N_{\text{isl}}^* \sim \exp\left(-\frac{\beta E_i}{i + 3}\right) \left(\frac{h}{F}\right)^{-\chi^*} \quad (22)$$

при переходе при $\Theta \approx \Theta^*$ и

$$N_{\text{isl}} \sim \Theta^{1/(i+2)} \exp\left(-\frac{\beta E_i}{i + 2}\right) \left(\frac{h}{F}\right)^{-\chi} \quad (23)$$

при Θ , близком к 1.

Скейлинг-показатели χ и χ^* удовлетворяют условиям $\chi = i/(i+2)$ и $\chi^* = (i+1)/(i+3)$, откуда

$$\chi^* - \chi = \frac{2}{(i+2)(i+3)} > 0,$$

т.е. в устойчивом режиме $N_{isl} > N_{isl}^*$. Это указывает на то, что в пределе $h/F \rightarrow \infty$ нуклеация происходит при устойчивом режиме. Это же верно и для конечных h/F , особенно при малых i .

Рассмотрим скейлинг распределений размеров островков. При высоких значениях отношения коэффициента диффузии адатомов D к потоку напыления F , $D/F \rightarrow \infty$, ожидаемая форма распределения плотности островков, состоящих из s атомов, в момент времени t имеет вид

$$n(x, \langle s \rangle, \Theta) = \frac{\Theta}{\langle s \rangle^2} f(x), \quad x = \frac{s}{\langle s \rangle} \quad (24)$$

для всех времён, кроме очень коротких. Здесь $\langle s \rangle$ и Θ — зависящие от времени средний размер островка и покрытие соответственно. $f(x)$ является универсальной масштабирующей функцией (скейлинг-функцией), которая не зависит ни от $\langle s \rangle$, ни от Θ . Так как поверхностная плотность островков N связана с величинами $\langle s \rangle$ и Θ соотношением $N\langle s \rangle \cong \Theta$, скейлинг-функция должна удовлетворять двум условиям нормировки:

$$\int_0^\infty f(x) dx = \int_0^\infty x f(x) dx = 1. \quad (25)$$

Характерный вид скейлинг-функции для разных значений Θ представлен на рис. 10. В процессе моделирования процесс роста островков всегда полагается необратимым или с зависящим от времени критическим размером островка. Необратимый характер роста приводит к ярко выраженной асимметрии формы функции распределения, в отличие от модели, позволяющей распад островков. Для обратимого роста, наоборот, характерны функции распределения, близкие по форме к нормальному распределению [93].

При исследованиях роста островков обычно рассматривается модель гетерогенного необратимого роста [107, 108]. Рассмотрим для примера простую модель, в которой островки A_s растут за счёт мобильных адатомов A_1 по схеме $A_s + A_1 \rightarrow A_{s+1}$, $s \geq 1$, которая описывается набором уравнений кинетического баланса для concentra-

ций островков на поверхности N_s :

$$\frac{dN_1}{dt} = F - 2D\sigma_1 N_1^2 - DN_1 \sum_{s \geq 2} \sigma_s N_s, \quad (26)$$

$$\frac{dN_s}{dt} = DN_1(\sigma_{s-1} N_{s-1} - \sigma_s N_s), \quad s \geq 2,$$

где σ_s — зависящий от размера кластера коэффициент захвата, вводимый как

$$\sigma_s(\Theta) = \alpha(\Theta)(a + s - 1), \quad s \geq 1, \quad (27)$$

где $\alpha(\Theta)$ — некоторая функция, позволяющая достичь согласия с результатами численного моделирования [99, 109, 110] при больших значениях s . Стоит отметить, что не для всех размеров островков σ является линейной функцией [99, 109–112]. Поэтому данная модель может не давать полного соответствия с реальным экспериментом. Однако такой выбор выражения для σ позволяет получить точное аналитическое решение в форме модифицированного бета-распределения, зависящего от двух параметров, a и p , и подчиняющегося условию (25).

Согласно работам [113, 114], уравнения кинетического баланса (26) можно упростить, введя зависящую от времени переменную z согласно

$$\frac{dz}{dt} = DN_1 \alpha, \quad z(t=0) = 0, \quad (28)$$

что приводит к их линеаризации. Предположим степенной характер

$$\alpha(\Theta) = c\Theta^p, \quad (29)$$

где $c > 0$, $p > -1$. Решая систему уравнений методом производящих функций, получаем дискретное распределение размеров островков в следующем виде [108]:

$$N_{s+1}(\langle s \rangle, \Theta) = \frac{\Theta}{\langle s \rangle^2} \frac{(p+1)b^{p+1}}{a\langle s \rangle^p} \frac{B(s, a-p)}{B(s, a)} \times \\ \times I_{1-b/\langle s \rangle}(s, a-p), \quad (30)$$

где

$$b = \frac{(a+1)(p+1)}{p+2}, \quad (31)$$

$$I_y(s, q) = \frac{1}{B(s, q)} \int_0^y t^{s-1} (1-t)^{q-1} dt \quad (32)$$

является регуляризованной неполной бета-функцией, а $B(s, q)$ — бета-функция:

$$B(s, q) = \frac{\Gamma(s)\Gamma(q)}{\Gamma(s+q)}, \quad (33)$$

$\Gamma(s)$ — гамма-функция. Полученное распределение (30) зависит от двух параметров, a и p , имеющих разный физический смысл в зависимости от описываемой системы. Параметр p определяет зависимость коэффициента захвата σ_s от степени покрытия Θ и равен нулю при их независимости. В частности, в случае гомогенного роста двумерных островков параметр a получил название частоты или скорости димеризации [108].

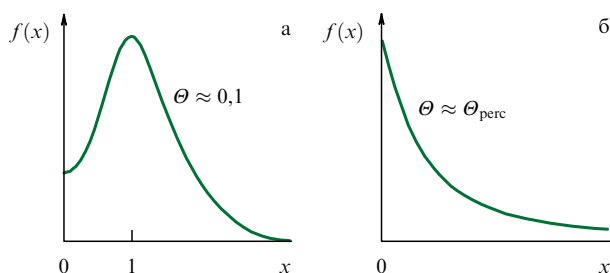


Рис. 10. Схематическое изображение скейлинг-функций для распределений размеров островков $f(x)$ от масштабированного размера островка $x = s/\langle s \rangle$ при низком значении покрытия Θ (а) и вблизи порога перколяции (б). Адаптировано из [93].

Пользуясь асимптотикой неполной бета-функции при $s \rightarrow \infty$, $\langle s \rangle \rightarrow \infty$ и конечных значениях b и $a - p$, можно записать

$$I_{1-b/\langle s \rangle}(s, a - p) \cong \gamma\left(\frac{bs}{\langle s \rangle}, a - p\right), \quad (34)$$

где

$$\gamma(y, a) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_y^\infty t^{a-1} \exp(-t) dt \quad (35)$$

является регуляризованной неполной гамма-функцией. Пользуясь также свойством гамма- и бета-функции

$$\frac{B(s, a - p)}{B(s, a)} \cong s^p \frac{\Gamma(a - p)}{\Gamma(a)}, \quad s \gg a, \quad (36)$$

получаем континуальное приближение дискретного распределения (30) в форме (24) со скейлинг-функцией $f(x)$, имеющей вид

$$f(x) = (p + 1)p^{b+1} \frac{\Gamma(a - p)}{\Gamma(a + 1)} x^p \gamma(bx, a - p). \quad (37)$$

Видно, что скейлинг-функция (37) является универсальной, т.е. не зависит ни от $\langle s \rangle$, ни от Θ . Как можно убедиться с помощью подстановки её в условие нормировки (25), она удовлетворяет ему для любых a и p . На рисунке 11 изображено сравнение численных решений уравнений кинетического баланса (26) с зависимостью $f(x)$, удовлетворяющей уравнениям (27) и (29) со значениями параметров $a = 2$, $p = 0,5$, $c = 10$, $D/F = 10^5$.

Гипотеза скейлинга успешно применяется и для описания роста одномерных структур на поверхности как при численном моделировании кинетическим методом Монте-Карло [35, 88, 90, 115, 116], так и в реальном эксперименте для различных систем [86, 89, 117, 118].

Например, исследовался рост цепочек Ga [86] и In [89] на поверхности Si(100) как экспериментально с помощью СТМ, так и при моделировании кинетическим методом Монте-Карло. Отличительной особенностью поверхности Si(100) является наличие дефектов разных типов [119]. В связи с тем что, как было показано, наличие многих дефектов не сильно влияет на результаты, некоторыми типами дефектов можно пренебречь, кроме тех, которые являются центрами нуклеации. При комнатной температуре при осаждении Ga со скоростью напыления $F = 10^{-3}$ МС с^{-1} провода галлия формировались в направлении, перпендикулярном димерам кремния, составляющим поверхность. Расчёты, проведённые для шести разных значений степени покрытия (от 0,066 до 0,131 МС) показывают, что распределения длин цепочек накладываются друг на друга, будучи построенными в нормированных координатах, подтверждая тем самым теорию скейлинга. Аналогичные результаты наблюдаются и для In/Si(100).

Особый интерес представляют результаты расчётов, в которых показано, при каких условиях эксперимента функция распределения длин атомных цепочек будет из монотонно убывающей функции (рис. 8а) переходить в функцию с явно выраженным максимумом (рис. 8б).

Так, при критической концентрации дефектов, равной 0,0025 МС, происходит изменение вида функции распределения размеров цепочек от мономодального к моно-

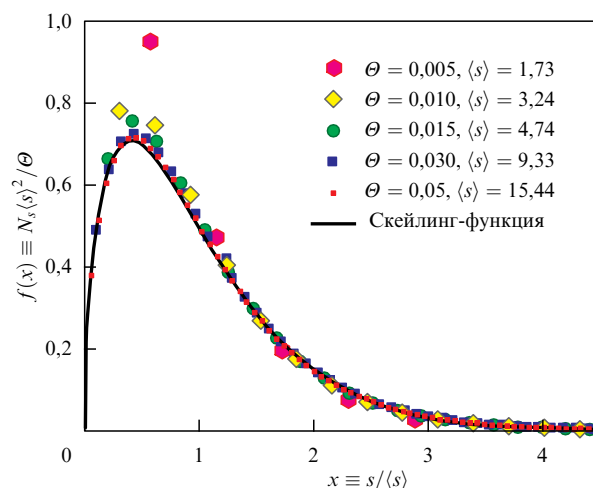


Рис. 11. (В цвете онлайн.) Сравнение численных решений уравнений кинетического баланса с линейными по размеру островка коэффициентами захвата, $a = 2$, $p = 0,5$, $c = 10$, $D/F = 10^5$, при разных значениях параметра порядка Θ . Аналитическая функция $f(x)$ показана сплошной линией. Адаптировано из [108].

тонно убывающему [36]. В [87] показана возможность изменения формы распределения от мономодального к монотонно убывающему виду путём изменения температуры или степени покрытия напыляемых атомов. В [33] утверждается, что при термодинамическом равновесии функция распределения по длинам одномерных атомных структур имеет максимум в случае, когда зависимость энергии связей цепочек от длины имеет положительную кривизну. Однако при такой зависимости энергии связи атомы в коротких цепочках будут отталкиваться, а в длинных, наоборот, притягиваться. В результате димеры не должны образовываться, потому что атомы будут отталкиваться. Тем не менее димеры являются центрами роста одномерных структур.

Таким образом, основным достоинством скейлинг-функций является их простота. В то же время их главным недостатком является невозможность получения количественных характеристик.

3.3. Анализ распределений длин атомных цепочек с использованием кинетического метода Монте-Карло

Рассмотрим теперь другой подход для анализа распределений длин атомных цепочек на примере систем Co/Cu(775) и Ag/Pt(997). В этом подходе используется кинетический метод Монте-Карло. Использование КММК является трудоёмким, поскольку необходимо рассчитывать в рамках теории функционала плотности такие энергетические характеристики, как диффузионные барьеры и энергии связи [37–39, 83]. При использовании в КММК очень простой теоретической модели все эти параметры можно подобрать путём варьирования [84].

Распределения длин атомных цепочек для Co/Cu(775) при двух различных температурах, 160 и 190 К, полученные с помощью КММК, показаны на рис. 12а. С ростом температуры средняя длина цепочек кобальта и её среднеквадратическое отклонение увеличиваются. Для Co/Cu(775) распределение длин цепочек относится ко второму типу распределений, имеющих один максимум, хорошо аппроксимируется распределением Гаусса и плохо аппроксимируется равновесным распределением (кри-

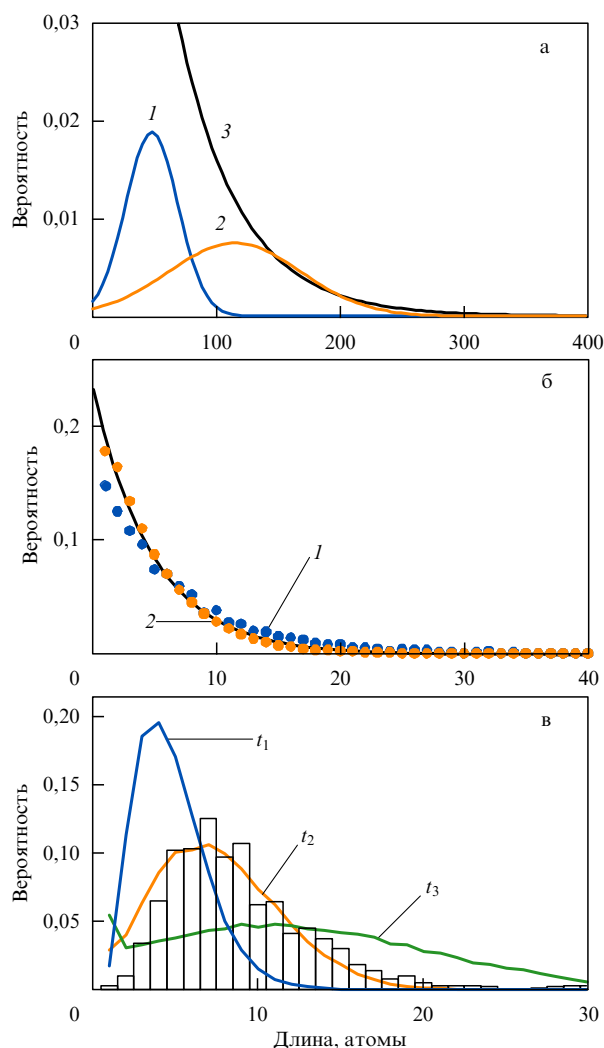


Рис. 12. (В цвете онлайн.) Распределения длин атомных цепочек Co/Cu(775) (а) и Ag/Pt(997) (б) для температур 160 К (1) и 190 К (2). Сплошной чёрной линией показана подгонка в рамках одномерной модели решётчного газа [32]. (в) Распределения длин цепочек для Ag/Pt(997) при $T = 100$ К в зависимости от времени эксперимента ($t_1 = 1$ ч, $t_2 = 5$ ч, $t_3 = 1$ день). Гистограмма взята из экспериментальной работы [31].

вая 3 на рис. 12а). Для Ag/Pt(997) наблюдается иная ситуация. С увеличением температуры распределение длин цепочек изменяется незначительно и хорошо аппроксимируется равновесным распределением (рис. 12б).

Подобное различие связано с тем, что энергии связи для Co/Cu(775) и Ag/Pt(997) различаются на порядок, поэтому диффузионные процессы в этих системах протекают с разной скоростью. Например, для атомных цепочек серебра энергия связи E_{bind} равна 0,06 эВ, и система при 160 К за несколько секунд приходит к термодинамически равновесному состоянию. Если температуру понизить, то время, за которое система придёт в термодинамическое равновесие, значительно увеличится. Как видно из рис. 12в, при 100 К система Ag/Pt(997) не успевает прийти в термодинамическое равновесие даже за несколько дней. При этом, однако, начинает появляться максимум для одиночных атомов (кривая t_3 на рис. 12в). Стоит отметить, что при температуре ниже 105 К атомы серебра возле ступени становятся менее подвижными, поэтому атомные цепочки при низких температурах за

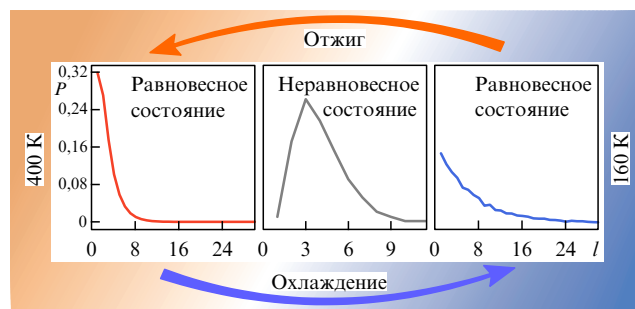


Рис. 13. Схематическое изображение, показывающее, как распределение длин атомных цепочек изменяется во время охлаждения или отжига [39].

время проведения эксперимента не успевают прийти в равновесное состояние.

В большинстве случаев одномерные атомные структуры получают при отжиге при температуре выше комнатной, и система довольно быстро приходит в равновесное состояние. Перед тем как сделать измерения, образец предварительно охлаждают. Рассмотрим более подробно процесс перехода из одного равновесного состояния в другое при охлаждении. В начальный момент времени при высокой температуре атомные цепочки находятся в равновесном состоянии (рис. 13 слева). В состоянии равновесия количество атомов, отсоединившихся от цепочки, равно количеству атомов, присоединившихся к ней. При уменьшении температуры уменьшается скорость движения одиночных атомов и увеличивается время жизни цепочек. Поскольку среднее время жизни коротких цепочек значительно меньше, чем длинных, они быстро распадаются. Таким образом, количество коротких цепочек уменьшается, а количество длинных цепочек увеличивается. В этот момент атомные цепочки находятся в неравновесном состоянии (рис. 13 в центре). Одновременно растёт и расстояние между цепочками. Когда оно становится критическим, атом, отсоединившийся от одной цепочки, не успевает присоединиться к другой. В этом случае происходит возрастание количества одиночных атомов и коротких цепочек, расположенных между двумя длинными цепочками. Как следствие, в распределении длин цепочек появляется второй максимум для одиночных атомов. Далее система приходит в равновесное состояние и хорошо описывается моделью одномерного решётчного газа (рис. 13 справа). Таким образом, при охлаждении или отжиге одномерные структуры из одного состояния равновесия переходят в другое через неравновесное состояние, которое и наблюдается экспериментально. Из рисунка 12в видно, что результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Исследования эволюции одномерных атомных структур кинетическим методом Монте-Карло показывают, что распределение длин одномерных структур зависит не только от внешних параметров эксперимента, но и от времени. Поскольку при низких температурах для многих одномерных структур время их жизни значительно больше времени проведения эксперимента, они находятся в неравновесном состоянии. Поэтому нельзя использовать для анализа экспериментальных данных модели, в которых одномерные структуры рассматриваются как равновесные.

Приведённые примеры качественно показывают, как размер одномерных структур зависит от различных внешних параметров. Тем не менее возникает проблема определения значений физических величин из распределения размеров одномерных структур для фундаментальной физики. Это связано с тем, что единственным на сегодняшний день способом определения энергии связи и других энергетических характеристик остаётся сопоставление экспериментальных данных с результатами моделирования. Другие подходы либо не годятся, либо дают только качественную оценку.

4. Структурные свойства атомных проводов

Физические свойства металлических атомных цепочек и проводов в значительной мере зависят от размеров, формы и их химического состава. Поэтому важным и актуальным является исследование структурных свойств и определение условий стабильности одномерных структур.

4.1. Определение структуры и химического состава атомных цепочек

В последние годы широкое применение для исследования атомных одномерных структур получила сканирующая туннельная микроскопия, которая обладает большой разрешающей способностью, что позволяет получать информацию о геометрии и структуре таких систем. Однако СТМ не позволяет определить химический состав атомных структур. При формировании цепочек на поверхности (см. рис. 2 или рис. 14) для определения их структуры достаточно использовать только СТМ. Однако в то время, когда исследуются погружённые в поверхность атомные цепочки, использования СТМ для определения их структурных свойств недостаточно. Поэтому для исследований структурных свойств используют комбинации разных методов: использование нескольких экспериментальных методов или экспериментальных методов и компьютерного моделирования.

На рисунке 14а, б в качестве примера представлены СТМ-изображения атомных цепочек $\text{Co}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}\text{O}_2$ (а) и $\text{Co}_{0,67}\text{Ni}_{0,33}\text{O}_2$ (б). При этом атомы кислорода не видны на СТМ-изображении, но, зная соотношения атомов в сплаве, можно определить химический состав атомных цепочек. Например, на рис. 14а ровно половина ярких и

тусклых точек, в то время как на рис. 14б ярких точек в два раза меньше. Из анализа этих двух СТМ-изображений можно сделать вывод, что яркие точки — это атомы Ni, а тёмные — атомы Co. Зная химический состав атомных цепочек, можно далее исследовать их свойства. Как видно из рис. 14в, атомы Co в цепочке находятся ближе к поверхности, чем атомы Ni, следовательно, сильнее взаимодействуют с атомами поверхности. Следует отметить, что, кроме изображённых на рис. 14а, б Co и Ni, атомные цепочки длиной до 500 атомов хорошо формируются также из оксидов сплавов других переходных металлов. Подобные цепочки из различных сплавов переходных металлов открывают уникальную возможность формирования сложных систем, например, магнитных структур для элементов памяти, в которых ферромагнитные цепочки были бы разделены антиферромагнитными или немагнитными цепочками [12].

Приведённый пример показывает, что с помощью СТМ нельзя определить химический состав наноструктур. Особенно это проявляется для материалов с несколькими типами атомов, поскольку неясно, какой тип атома виден и в каком положении. Более того, СТМ-изображения не относятся непосредственно к конкретным атомам, а отображают распределения электронной плотности. Для полупроводников максимум электронной плотности соответствует атомным связям, а в случае металлов — атомам. Поэтому для определения структуры вместе с СТМ используются расчёты в рамках теории функционала плотности [19, 24, 69, 120–125]. Этот метод позволяет определить химический состав наноструктур, но имеет разного рода ограничения: количество атомов в расчётной ячейке, время моделирования и т.п. Кроме того, для проведения расчётов необходимо задать начальную конфигурацию, которая была бы достаточно близка к реальной структуре.

В качестве примера такого комплексного применения СТМ и теоретических расчётов рассмотрим систему Pt/Ge(001). Как видно из рис. 1в, одномерные структуры формируются на поверхности Ge(001) при напылении атомов Pt. Несмотря на наличие СТМ-изображения отличного качества, на котором видно расположение отдельных атомов и димеров, реальная атомная структура проводов остаётся неопределённой, поскольку СТМ не позволяет узнать их химический состав. Для определения состава и структуры атомных проводов Pt на поверхности Ge(001) использован следующий подход [18, 21, 24, 120, 123, 126]. Сначала была построена модель поверхности с атомными проводами, изображённая на рис. 15а. Далее были смоделированы СТМ-изображения для заполненных (рис. 15б, слева) и незаполненных состояний (рис. 15б, справа). Как видно из рис. 15, смоделированное СТМ-изображение соответствует экспериментальному. В случае если смоделированные СТМ-изображения не соответствуют экспериментальным, то предлагается новая модель, и алгоритм повторяется.

В упомянутых работах было предложено несколько моделей структуры атомных проводов. Так, в модели из работы [126] атомы Pt располагаются между двумя рядами поверхностных димеров Ge. Анализ электронной плотности показывает значительную гибридизацию орбиталей атомов Pt. Поэтому при сканировании СТМ и будут видны провода, состоящие из димеров. В другой работе [123] была предложена структурная модель, в которой атомы Pt погружаются в поверхностный слой, а

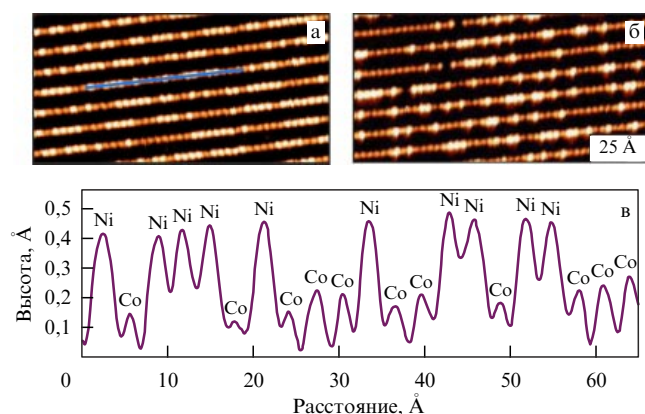


Рис. 14. (а, б) СТМ-изображения атомных цепочек $\text{Co}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}\text{O}_2$ и $\text{Co}_{0,67}\text{Ni}_{0,33}\text{O}_2$. (в) Смещение атомов цепочки $\text{Co}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}\text{O}_2$ относительно поверхности [12].

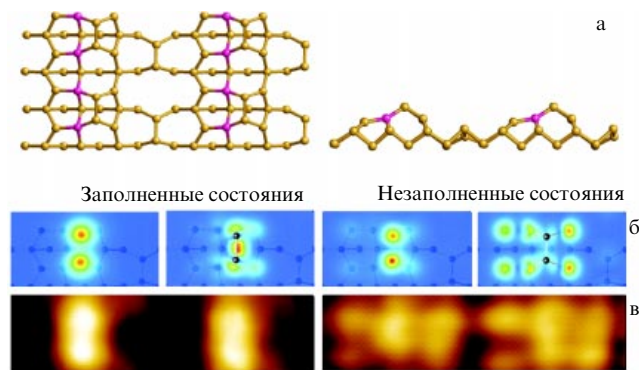


Рис. 15. (а) Модель атомных проводов Pt на поверхности Ge(001). Вид сверху (слева) и сбоку (справа). (б, в) Сравнение смоделированных (б) и экспериментальных (в) СТМ-изображений для заполненных и незаполненных состояний [19]. (г) Рассчитанная плотность состояний для Pt/Ge(001) при разных значениях $k_B T$: 10 мэВ (1), 100 мэВ (2) и дифференциальный спектр проводимости dI/dV (3).

сверху над ними димеры Ge формируют одномерные структуры. Похожая модель была развита в работах [19, 24]. В ней погружённые провода из атомов Pt чередуются с рядами поверхностных димеров, находящихся рядом. Каждый второй поверхностный димер при этом распадается.

Однако сравнение изображений, полученных экспериментально и с помощью моделирования, бывает недостаточным для определения геометрии и химического состава. Поэтому для нахождения этих параметров наноструктур иногда сравнивают и другие характеристики, например спектр проводимости с плотностью состояний одномерных структур [18, 19]. Сравнение дифференциального спектра проводимости с рассчитанной усреднённой плотностью состояний при разной температуре показано на рис. 15в. При низкой температуре плотность состояний на уровне Ферми ($E = 0$) равна нулю. Энергетическая щель возникает и при энергии 0,25 эВ ниже уровня Ферми в направлении атомного провода, что согласуется с экспериментом [127]. Пик плотности состояний между двумя энергетическими щелями обусловлен d-состояниями атомов Pt и sp^3 -состояниями атомов Ge. При повышении температуры локализованное состояние размывается и энергетические щели на уровне Ферми при энергии 0,25 эВ исчезают (рис. 15г). Таким образом, при низких температурах одномерные атомные провода Pt на поверхности Ge(001) являются полупроводниками [127], в то время как при комнатной температуре — металлами [19].

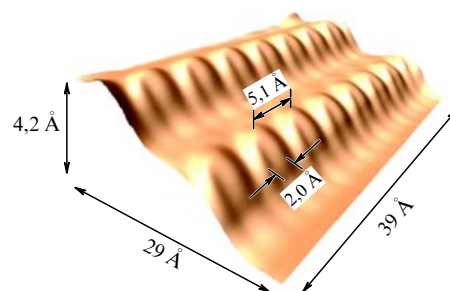


Рис. 16. СТМ-изображение димеризованной цепочки кобальта на вицинальной поверхности меди [61].

4.2. Структурный фазовый переход в атомных цепочках кобальта на вицинальной поверхности меди

В некоторых случаях поверхность с одномерными структурами имеет несколько фаз [17, 18, 61]. Рассмотрим это явление подробно на примере атомных цепочек кобальта на вицинальной поверхности меди. В работе [61] было экспериментально обнаружено наличие двух фаз в длинных атомных цепочках кобальта. В них на поверхности Cu(775) при $T = 5$ К атомы находятся на разных расстояниях друг от друга (рис. 16). Измерения с помощью СТМ показали, что при низких температурах расстояние между атомом кобальта и его двумя ближайшими соседями равно 0,20 и 0,31 нм — наблюдается процесс димеризации. Для сравнения межатомное расстояние для треугольных атомных островков кобальта на поверхности меди равно 0,250–0,256 нм. При изменении температуры с 5 до 91 К наименьшее расстояние между атомами в цепочке изменяется с 0,200 до 0,256 нм. Таким образом, при температуре, меньшей, чем 91 К, наблюдаются две разные фазы цепочек. С увеличением длины цепочки влияние крайних атомов становится меньше, и в результате наблюдается процесс димеризации. Поэтому структура коротких атомных цепочек кобальта, расположенных возле ступени вицинальной поверхности меди (111), будет отличаться от структуры длинных атомных цепочек кобальта [128]. Это связано с тем, что атомы кобальта на краях цепочек более свободные и, как следствие, взаимодействия между атомами кобальта и атомами меди ступени могут значительно изменяться. Например, цепочка из пяти атомов Co на поверхности Cu(554) имеет сложную форму, похожую на букву "М". Крайние атомы вместе с центральным атомом смещаются вниз, все остальные атомы смещаются вверх. При этом атомы поверхности меди под атомной цепочкой смещаются вниз.

Димеризация атомных цепочек кобальта была подтверждена и при помощи вычислений в рамках теории функционала плотности [62, 129], хотя ранее утверждалось, что в рамках теории функционала плотности [130] невозможно найти димеризованную структуру атомных цепочек кобальта на ступенчатых поверхностях меди [131]. Данное разногласие связано с тем фактом, что магнитное взаимодействие в наноструктурах очень чувствительно к межатомным расстояниям [27, 128, 132–134]. Поэтому для определения равновесного состояния необходимо проводить многократные вычисления с различными начальными расположениями атомов в системе и с разными расчётными ячейками, что не было сделано в более ранней работе [131]. Так, например, вицинальная

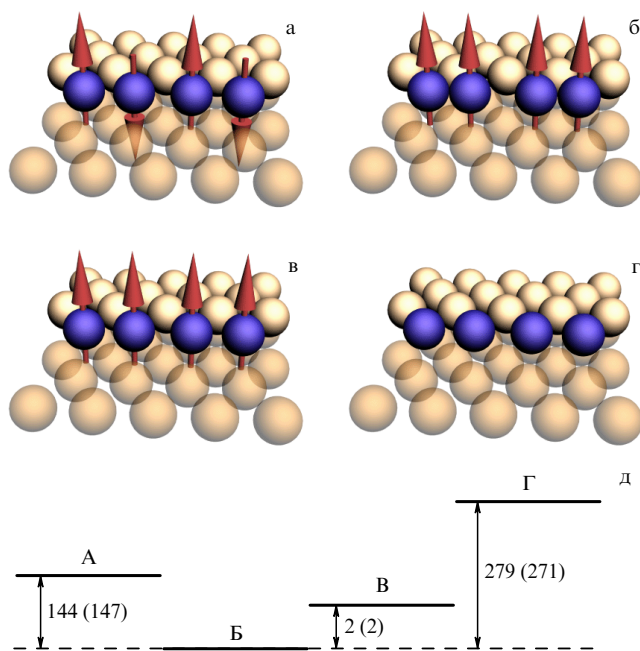


Рис. 17. Антиферромагнитная (а), димеризованная ферромагнитная (б), недимеризованная ферромагнитная (в) и конфигурация с нулевыми спинами (г) цепочек Со на вицинальной поверхности Cu(111); (д) энергетическая диаграмма с удельными значениями энергии связи атомов в цепочке (мэВ на атом) для ступени типа В. Значения для ступени типа А даны в скобках [62, 129].

поверхность меди в работе [131] была смоделирована в виде периодически повторяющихся слоёв, состоящих из 8 атомных слоёв, а в работе [62] — из 60 атомных слоёв.

Энергетическая диаграмма атомных цепочек кобальта возле атомной ступени медной поверхности показана на рис. 17. Среди множества конфигураций были выбраны следующие: цепочка с антиферромагнитным упорядочением спинов и равномерным расположением атомов (рис. 17а), димеризованная цепочка с ферромагнитным упорядочением спинов (рис. 17б), недимеризованная цепочка с ферромагнитным упорядочением спинов (рис. 17в) и цепочка с нулевыми спинами и равномерным расположением атомов (рис. 17г). Из энергетической диаграммы (рис. 17д) следует, что наиболее энергетически выгодным является состояние Б, однако разница в энергии относительно В (энергия димеризации ΔE) очень невелика. Она равна 2 мэВ на атом для поверхности Cu(111) и $\Delta E = 4$ мэВ на атом для поверхности Cu(332), что и объясняет неустойчивость димеризованных цепочек при повышении температуры выше некоторого критического значения. Однако энергия димеризации цепочки кобальта на поверхности меди (775) значительно выше (6 мэВ на атом), чем на поверхности меди (111) (2 мэВ на атом) [62, 129]. Межатомные расстояния в димерах для поверхностей меди (775) и (111) равны 0,23 и 0,24 нм соответственно. Во всех перечисленных случаях ступенчатая поверхность состоит из небольших террас, и атомные цепочки Со, расположенные возле соседних ступеней, взаимодействуют друг с другом. Таким образом, энергия димеризации цепочек зависит и от ширины террас поверхности.

На формирование димеризованной фазы в атомных цепочках кобальта существенно влияет электрическое поле. Экспериментально установлено, что чем больше раз-

ность потенциалов между иглой СТМ и поверхностью, тем выше температура, при которой наблюдается димеризация атомной цепочки. Это связано с тем, что поверхность и атомная цепочка под действием электрического поля деформируются [135]. Известно, что остриё СТМ не бывает гладким. Поэтому на поверхности основного острия существует мини-остриё (один или несколько атомов), с помощью которого и осуществляется сканирование наноструктур [136]. Если расстояние между иглой и атомной цепочкой достаточно мало, то вблизи иглы СТМ под действием электрического поля будет возникать существенная деформация цепочки. При сканировании иглой вдоль атомной цепочки постоянно меняется область деформации, и определить с большой точностью расстояния между атомами невозможно, поскольку СТМ-изображения размыты. При увеличении расстояния между цепочкой и иглой СТМ влияние мини-острия становится несущественным, в этом случае область деформации будет иметь размер несколько нанометров [135]. Радиус кривизны СТМ-иглы равен 2–30 нм, что соизмеримо со средней длиной рассматриваемых цепочек. В этом случае СТМ-игла будет изменять свойства целой цепочки при взаимодействии с ней. Если исключить влияние мини-острия, то явление димеризации атомных цепочек кобальта зависит только от разности потенциалов между иглой и цепочкой [135]. Это подтверждается результатами расчётов, которые показывают, что энергия димеризации цепочки ΔE при взаимодействии с иглой СТМ изменяется с 2 до 18 мэВ на атом [62, 129]. Поэтому чем больше разность потенциалов между иглой СТМ и поверхностью, тем больше температурный интервал, внутри которого будет наблюдаться димеризация атомной цепочки [61].

Моделирование фазового перехода в атомных цепочках Со на поверхности Cu(775) показало, что температура фазового перехода зависит и от длины атомных цепочек [62, 129]. Для этого был использован алгоритм Метрополиса [137] в рамках простой модели, в которой состояние атомной цепочки Со характеризуется параметром порядка η , определяемым как

$$\eta = \frac{2}{N} \left| \sum_{i=1}^{N/2} s_{2i} \right|, \quad (38)$$

где N — число атомов в цепочке, s_i — параметр, определяющий положение i -го атома относительно идеального расположения. Для атома в идеальной позиции $s_i = 0$, для атома, смещённого влево, $s_i = -1$ и для атома, смещённого вправо, $s_i = 1$ (рис. 18). Суммирование в выражении (38) проводится по всем чётным узлам, поэтому в случае полностью димеризованной цепочки $\eta = 1$. На каждом шаге случайно выбирается атом с номером i и направление его смещения $\Delta s = \pm 1$.

Эволюция системы протекает по следующим правилам. Если $s_i = 0$ и $s_{i+\Delta s} = 0$, то система переходит в новое

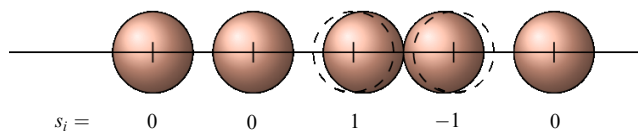


Рис. 18. К вычислению параметра порядка η .

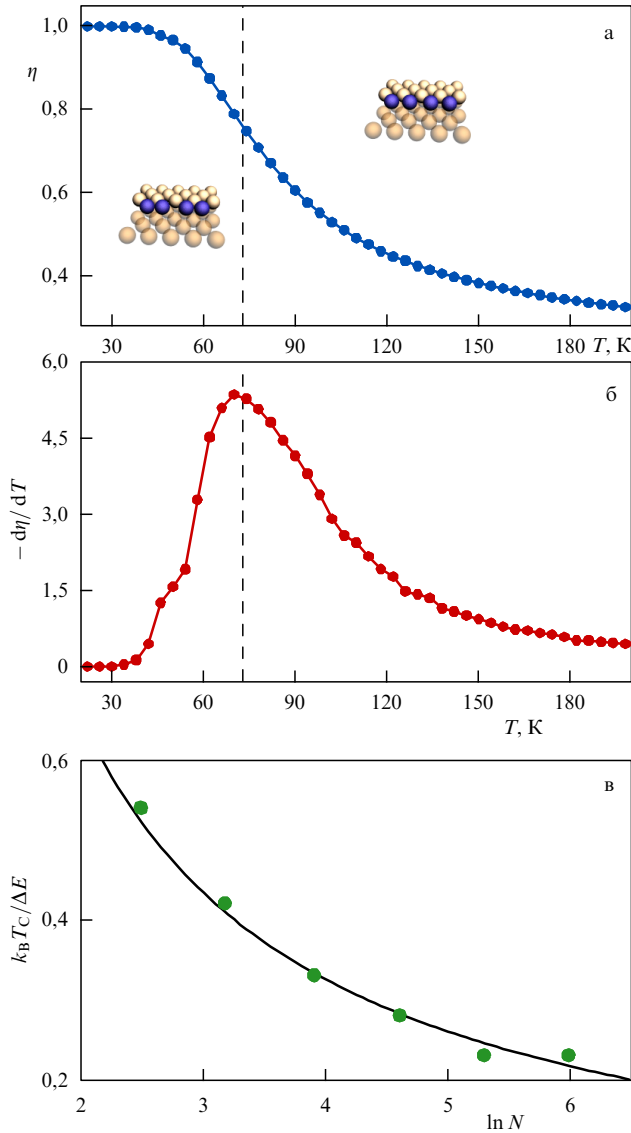


Рис. 19. Зависимость параметра порядка η (а) и его производной $-d\eta/dT$ (б) от температуры. Длина цепочки Co — 32 атома, $\Delta E = 16$ мэВ. Параметр порядка η был определён по результатам 2000 численных экспериментов [62]. (в) Зависимость температуры фазового перехода T_c от длины цепочки. Линией показана аппроксимация по формуле (39).

состояние $s_i = \Delta s$ и $s_{i+\Delta s} = -\Delta s$, т.е. происходит образование димера из i -го и $i + \Delta s$ -го атомов, приводящее к понижению общей энергии системы на $2\Delta E$, где $2\Delta E$ — разница энергий димеризованной цепочки и цепочки с равными межатомными расстояниями, приходящаяся на один атом (энергия димеризации). Иначе, если $s_i = \pm 1$ и $\Delta s = -s_i$, то с вероятностью $\exp(-2\Delta E/k_B T)$ система может перейти в новую конфигурацию $s_i = 0$ и $s_{i+\Delta s} = 0$. Процесс распада димера сопровождается увеличением общей энергии на $2\Delta E$.

На рисунке 19а показана зависимость параметра порядка η цепочки, состоящей из 32 атомов Co , от температуры. При нулевой температуре все атомы цепочки образуют димеры, таким образом, $\eta = 1$. С увеличением температуры симметрия цепочки нарушается, и параметр порядка η монотонно уменьшается и стремится к нулю. Такая ситуация типична для фазового перехода

второго рода. Температура фазового перехода T_c определяется положением максимума производной параметра порядка со знаком минус, $-d\eta/dT$ (рис. 19б). Так, например, для цепочки длиной 32 атома с энергией димеризации 16 мэВ температура фазового перехода равна 71 К, что согласуется с экспериментом [131].

Необходимо отметить зависимость температуры фазового перехода от длины цепочки (размерный эффект). При увеличении длины цепочки температура фазового перехода уменьшается и стремится к нулю в пределе бесконечной цепочки (рис. 19в), что находится в согласии с одномерной моделью Изинга [138]. Зависимость температуры фазового перехода от длины цепочки хорошо аппроксимируется формулой

$$T_c = A \frac{\Delta E}{\ln N}, \quad (39)$$

где $A = 20,16$ К мэВ $^{-1}$. Таким образом, температура фазового перехода в одномерных структурах зависит не только от разности потенциалов между СТМ-иглой и образцом, ширины террас поверхности, на которых они формируются, но и от их длины.

5. Квантовые эффекты в атомных цепочках

Динамичное развитие электроники и вычислительной техники требует постоянной миниатюризации различных устройств, и, в первую очередь, носителей информации. Одним из способов такой минимизации и увеличения плотности размещения информации является использование в качестве её носителей магнитных атомных проводов, расположенных на различных поверхностях. Поэтому необходимо знать не только способы формирования атомных проводов, но и их электронные свойства.

5.1. Плотность состояний двумерного электронного газа

Для анализа электронных свойств атомных цепочек и влияния на них поверхностных состояний рассмотрим вначале плотность состояний идеализированной поверхности. Её простой моделью является модель двумерного электронного газа. В рамках этой модели можно получить выражение для плотности состояний идеализированной поверхности.

Рассмотрим подробно модель двумерного электронного газа и получим выражение для его плотности состояний. Пусть электроны могут свободно двигаться лишь в плоскости xy . В поперечном направлении (ось z) энергия квантуется и принимает дискретные значения E_{n_z} , где n_z — квантовое число. Полный спектр при этом тоже является дискретно-непрерывным, но лишь с двумя непрерывными степенями свободы:

$$E = E_{n_z} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m} = E_{n_z} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (40)$$

Для одной подзоны число разрешённых состояний в кольце площадью $2\pi k dk$ (k — волновое число) равно числу ячеек $(2\pi/L)^2$, где L — характерный размер. Поэтому число квантовых состояний равно

$$dN = 2 \frac{L^2}{(2\pi)^2} 2\pi k dk, \quad (41)$$

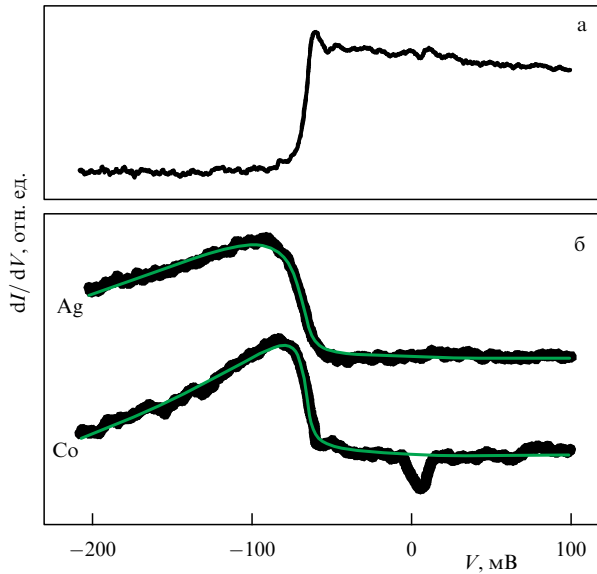


Рис. 20. Экспериментальный спектр проводимости dI/dV (а) чистой поверхности Ag(111) и (б) атомов Ag и Co на поверхности Ag(111) [139].

где множитель 2 учитывает два допустимых значения спинового квантового числа для каждого разрешённого значения $\mathbf{k}$. Перепишем теперь уравнение (41) через энергию

$$dN = \frac{L^2 m}{\pi \hbar^2} dE. \quad (42)$$

Для плотности состояний, приходящихся на единицу площади для одной подзоны, используя выражение (42), можно записать следующее выражение:

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}. \quad (43)$$

Как отмечалось выше, для двумерной системы есть ограничение по одному направлению (z), поэтому выражение (43) необходимо просуммировать по всем квантовым числам n_z :

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_{n_z} \Theta(E - E_{n_z}), \quad (44)$$

где $\Theta(E - E_{n_z})$ — функция Хевисайда.

Плотность состояний двумерного электронного газа равняется нулю для энергий, меньших, чем первый энергетический уровень. При энергии, равной первому уровню (дно поверхностных состояний), плотность состояний увеличивается скачком и постоянна до следующего энергетического уровня; такое скачкообразное увеличение происходит на каждом уровне. На рисунке 20а представлен экспериментальный спектр проводимости состояний двумерного электронного газа, который формируется вблизи поверхности. Как в модели двумерного электронного газа, так и в реальности плотность поверхностных состояний имеет вид ступеньки (рис. 20а). Например, дно поверхностных состояний для поверхности Ag(111) находится на 67 мэВ, а для Cu(111) — на 445 мэВ ниже уровня Ферми [139]. Для вицинальных поверхностей поверхностные состояния смещены в сторону более высоких энергий по сравнению с поверхностью Cu(111) [140–142]. Их положение зависит от ширины террас. В частности, для

Cu(443) и Cu(554) рассчитанные в рамках теории функционала плотности положения дна поверхностных состояний равны –170 и –300 мэВ (относительно уровня Ферми), а соответствующие экспериментальные значения равны –150 и –250 мэВ [140–142]. Кроме того, декорирование вицинальной поверхности магнитными атомными проводами также существенно влияет на поверхностные состояния [142, 143].

5.2. Локализация поверхностных состояний в одиночных атомах, краевые состояния атомных цепочек на поверхности

Если на поверхности расположить атом или атомную цепочку, то плотность состояний будет значительно отличаться от плотности состояний чистой поверхности. Так, вблизи края цепочки или атома плотность состояний уже имеет вид пика, который находится возле дна поверхностных состояний. Такие краевые состояния для атомных цепочек и атомов были впервые установлены экспериментально в [28, 139, 144]. Спектры проводимости, измеренные возле атомов Ag и Co, расположенных на поверхности Ag(111), показаны на рис. 20б. Спектры проводимости атомов имеют пики при энергии –70 мэВ для Ag(111) и –450 мэВ ниже уровня Ферми для Cu(111), что соответствует дну поверхностных состояний, показанных на рис. 20а.

Для реалистичного описания локализации поверхностного состояния на одиночных или краевых атомах следует принять во внимание связь между поверхностными и объёмными состояниями [139, 145]. Для этого рассмотрим расширенную модель Ньунса – Андерсона [146, 147], которая в нашем случае описывает атом в состоянии $|a\rangle$ с энергией ε_a , взаимодействующий с объёмными блоховскими состояниями $|q\rangle$ и с поверхностными состояниями $|k\rangle$ подложки Cu(111). Гамильтониан системы можно представить в виде:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_a & V_{aq} & \tilde{V}_{ak} \\ \tilde{V}_{aq}^* & \varepsilon_q & 0 \\ \tilde{V}_{ak}^* & 0 & \tilde{\varepsilon}_k \end{pmatrix}, \quad (45)$$

где ε_q — энергия объёмных электронов, $\tilde{\varepsilon}_k$ — энергия поверхностных электронов, а V_{aq} и $\tilde{V}_{ak}$ — матричные элементы взаимодействия. Здесь $\mathbf{k}$ означает двумерный волновой вектор Блоха, а $\mathbf{q}$ представляет собой трёхмерный вектор.

Спектр проводимости, снятый при нахождении кончика иглы СТМ над атомом, можно считать плотностью состояний атома $n_a(E)$. Применяя формализм метода функций Грина [139], получим

$$n_a(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Lambda(E)}{[E - \varepsilon_a - \Lambda(E)]^2 + \Lambda(E)^2}. \quad (46)$$

Мнимая часть собственной энергии $\Sigma(E) = \Lambda(E) + i\Delta(E)$ учитывает связь уровня атома как с объёмными $\Delta_b(E)$, так и поверхностными состояниями $\Delta_s(E)$:

$$\Lambda(E) = \Delta_b(E) + \Delta_s(E). \quad (47)$$

Объёмный вклад

$$\Delta_b(E) = \pi \sum_{\mathbf{q}} |V_{aq}|^2 \delta(E - \varepsilon_q) = \Delta_b \quad (48)$$

принимается постоянным во всём диапазоне энергий, представляющем интерес. Вклад поверхностных состояний

$$A_s(E) = \pi \sum_k |\tilde{V}_{ak}|^2 \delta(E - \tilde{\epsilon}_k) = A_s \Theta(E - E_0) \quad (49)$$

определяется ступенчатой функцией плотности поверхностных состояний. Вещественную часть $A(E)$ собственной энергии $\Sigma(E)$ можно выразить, зная $A(E)$ и используя преобразование Гильберта [139]. Плотность поверхностных состояний имеет логарифмическое расходящееся слагаемое при энергии, равной E_0 [148],

$$A(E) = \frac{A_s}{\pi} \ln |E - E_0| + C, \quad (50)$$

где C — константа.

Для количественной оценки экспериментальных результатов необходимо в рамках модели как можно точнее оценить плотность поверхностных состояний [139, 149]. Для этого необходимо учитывать время жизни электронов в поверхностном состоянии, что приведёт к сглаживанию функции плотности состояний и количественному совпадению с экспериментальным спектром проводимости. В этом случае плотность состояний может быть представлена как [149]

$$n(E) = \frac{1}{2} + \frac{\arctan [2(E - E_0)/\Gamma]}{\pi}, \quad (51)$$

где Γ — величина, обратная времени жизни поверхностного состояния. Тогда вещественная часть собственной энергии примет вид

$$A(E) = \frac{A_s}{2\pi} \ln \left[(E - E_0)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2} \right)^2 \right] + C. \quad (52)$$

От константы можно избавиться, если перенормировать энергию уровня примесного атома. Результаты теоретически рассчитанной плотности состояний атомов Ag и Co на поверхности Ag(111) показаны на рис. 20б (светлая линия). При построении плотности состояний атома параметры модели Ньюнса – Андерсона были получены путём подгонки под экспериментальные данные [139].

Подобные локализованные поверхностные состояния появляются не только в спектрах проводимости одиночных атомов на поверхности, но и у краевых атомов цепочки. На рисунке 21б представлен спектр проводимости цепочки, состоящей из семи атомов Au на поверхности Si(553), СТМ-изображение которой представлено на рис. 21а. Измерения были проведены при разных положениях СТМ-иглы, которые обозначены точками с цифрами на рис. 21а. Как видно из рис. 21б, для крайнего атома спектр проводимости имеет характерный пик, который пропадает при удалении от цепочки. Для второго с конца атома цепочки пик в спектре проводимости раздваивается. Объяснение этого явления будет дано в следующем разделе. Стоит отметить, что локализованные поверхностные состояния исчезают на расстоянии 1 нм от атома [28, 150]. Кроме того, результаты расчётов в рамках теории функционала плотности показывают, что локализованные поверхностные состояния в случае магнитных примесей являются спин-поляризованными [150 – 152]. В таком случае положение характерных пиков может немного отличаться по энергии для электронов с разной ориентацией спинов.

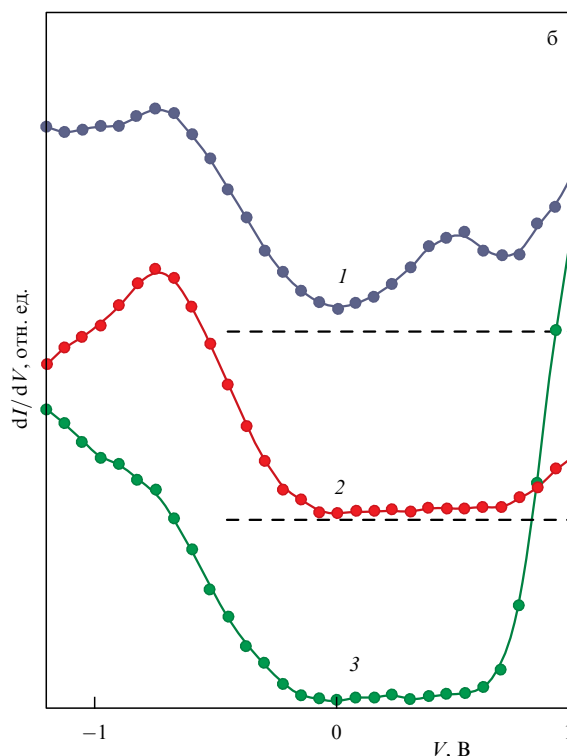


Рис. 21. (а) СТМ-изображение золотой атомной цепочки, состоящей из семи атомов на поверхности Si(553). (б) Экспериментальный спектр проводимости dI/dV , измеренный в разных точках возле края атомной цепочки. Кривая 1 соответствует спектру проводимости предпоследнего атома цепочки, кривая 2 — крайнего атома, кривая 3 соответствует спектру проводимости поверхности возле атомной цепочки [28].

5.3. Плотность состояний атомных цепочек

Рассмотрим теперь плотность электронных состояний в атомных цепочках. Изменение структуры и размера атомных цепочек приводит к изменению их электронных свойств. Размер атомных цепочек определяется числом атомов в них и межатомным расстоянием. Измерение плотности состояний для атомных цепочек производится при помощи сканирующей туннельной спектроскопии. Для этого игла СТМ располагается в точке, где необходимо исследовать электронные свойства системы, и измеряется спектр проводимости. Спектры проводимости, измеренные в середине золотых атомных цепочек разной длины на поверхности NiAl(110), показаны на рис. 22. Как видно из рис. 22, плотность состояний атомов в середине цепочки резко возрастает и плавно падает.

Аналитическое выражение для плотности состояний цепочек может быть получено в рамках модели одномерного электронного газа. Рассуждая аналогично, как

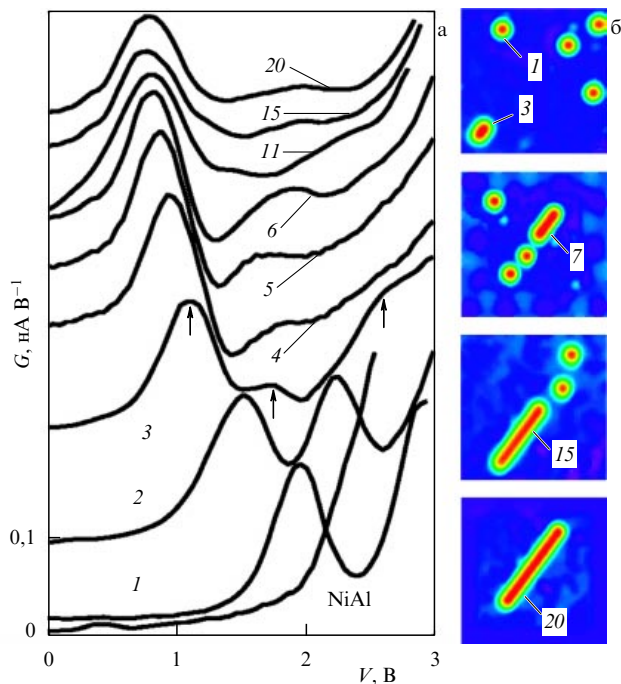


Рис. 22. (а) Спектры проводимости, измеренные в середине атомных цепочек Au разной длины (цифры у кривых указывают число атомов в цепочке). (б) СТМ-изображения атомных цепочек Au разной длины на поверхности NiAl(110) [153] (цифры указывают число атомов в цепочке).

это было сделано выше, можно получить выражение для плотности состояний одномерной системы [27]:

$$\rho^{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \sum_{n_y, n_z} \frac{\Theta(E - E_{n_y, n_z})}{\sqrt{E - E_{n_y, n_z}}}, \quad (53)$$

где n_y и n_z — квантовые числа.

Плотность состояний в идеализированном одномерном случае, согласно выражению (53), должна дискретно увеличиваться и далее спадать как $1/\sqrt{E}$ до следующего энергетического уровня. Такое скачкообразное увеличение и дальнейшее уменьшение плотности состояний происходит на каждом уровне. Таким образом, плотность состояний одномерной системы будет состоять из пиков, соответствующих каждому энергетическому уровню. Однако, в отличие от идеализированного случая, пики плотности состояний атомов в цепочке немного размыты по энергии, поскольку цепочка имеет конечную длину и её атомы взаимодействуют с поверхностью.

Спектр проводимости одиночного атома золота на поверхности NiAl(110) имеет резонанс, обладающий формой распределения Гаусса. Резонанс спектра проводимости происходит при значении напряжения, равном 1,95 В (см. рис. 22). При добавлении второго атома золота в соседнее положение происходит формирование димера и, как следствие, изменение электронных свойств атомов золота. Резонанс спектра проводимости одиночного атома при значении напряжения 1,95 В разделяется на дублет с пиками при 1,50 и 2,25 В, что свидетельствует о сильной связи между двумя атомами димера. Расщепление энергии аналогично хорошо известному примеру двух состояний водорода 1s, образующих уровни связывания и антисвязывания в молекуле водорода. Формиро-

вание цепочки из трёх атомов золота сдвигает один пик к 1,10 В, а другой пик — к 2,60 В. Появляется и третий пик в спектре проводимости при 1,80 В, обусловленный перекрытием электронных орбиталей атомов золота. Все пики на рис. 22 отмечены стрелками.

При дальнейшем изменении длины цепочки наблюдается изменение спектра проводимости или плотности состояний атомов в середине цепочки [153]. Из рисунка 22 видно, как пики спектра проводимости смещаются к более низким энергиям. Таким образом, незаполненные электронные состояния смещаются к уровню Ферми. Смещение пиков плотности состояний пропорционально L^{-2} , где L — длина атомной цепочки.

Наблюдаемые изменения спектра проводимости атомных цепочек демонстрируют зависимость электронных свойств системы от её геометрии. Таким образом, наблюдается корреляция между квантовыми эффектами и структурными свойствами на атомном масштабе. Зная зависимость электронных свойств одномерных структур от их длины, можно будет управлять свойствами структур и на их основе создавать электронные устройства. Кроме того, полезными для создания электронных устройств будут и краевые состояния, поскольку они позволяют определить край одномерных структур при помощи измерения спектра проводимости.

5.4. Эффект Рашбы

В работе [154] Э.И. Рашба показал, что если кристалл имеет одну ось высокой симметрии (не ниже третьего порядка) и вдоль неё ориентирован инвариантный вектор $\mathbf{n}$, то гамильтониан спин-орбитального взаимодействия электрона имеет вид

$$\hat{H}_R = \alpha \mathbf{n} [\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}], \quad (54)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы Паули, $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$ — оператор волнового вектора электрона, $\alpha = \text{const}$. Гамильтониан (54) снимает двукратное спиновое вырождение энергетического спектра в нулевом внешнем магнитном поле ($\mathbf{B} = 0$) и приводит к ряду нетривиальных эффектов при $\mathbf{B} \neq 0$. Позднее эффект Рашбы был исследован в случае двумерных систем [155, 156]. В данном случае вектор $\mathbf{n}$ — это нормаль к поверхности. Эффект Рашбы продолжает активно исследоваться для различных трёхмерных и двумерных систем. Новый виток интереса к эффекту Рашбы появился с открытием графена и других двумерных материалов.

В последнее время эффект Рашбы активно исследуется в одномерных системах: атомных проводах и цепочках. Для рассмотрения бесконечного провода или провода конечной длины необходимо обобщить гамильтониан Рашбы (54) на случай неоднородного провода ($\alpha \neq \text{const}$). Это можно сделать следующим образом [158]:

$$\hat{H}_R = \gamma \nabla U(\mathbf{r}) [\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}], \quad (55)$$

где $U(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия электрона, $\gamma = \text{const}$. При $\gamma U_R(\mathbf{r}) = \alpha(\mathbf{nr})$ и $\alpha = \text{const}$ обобщённый гамильтониан (55) переходит в (54). Полная потенциальная энергия электрона $U(\mathbf{r})$ помимо вклада $U_R(\mathbf{r})$ должна обязательно содержать потенциальную энергию конфинмента $U_c(\mathbf{r}_\perp)$, которая удерживает электрон внутри нанопровода. Здесь $\mathbf{r}_\perp$ — радиус-вектор в плоскости, перпендикулярной нанопроводу. Далее мы будем счи-

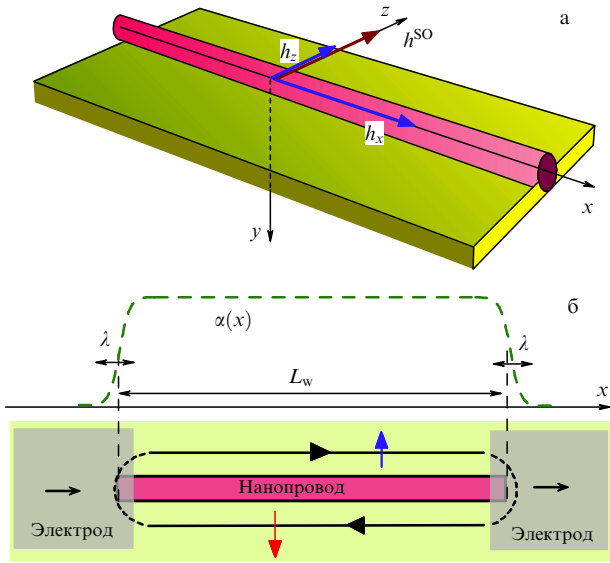


Рис. 23. Схематический рисунок (а) бесконечно длинного нанопровода и (б) нанопровода конечной длины, расположенного между двумя электродами [157]. SO — спин-орбитальное взаимодействие.

тать функцию $U_c(\mathbf{r}_\perp)$ достаточно гладкой для того, чтобы величиной $|\nabla U_c|$ в гамильтониане (55) можно было пренебречь по сравнению с $|\nabla U_R|$.

Сначала рассмотрим однородный бесконечно длинный провод в случае отсутствия внешних полей. Следуя работе [57], введём оси координат, как показано на рис. 23а: x — вдоль нанопровода, y — перпендикулярно поверхности, z — в плоскости поверхности, перпендикулярно нанопроводу. Если направление нормали к поверхности $\mathbf{n} = (0, -1, 0)$, то одноэлектронный гамильтониан равен

$$\hat{H} = \hat{H}_\perp + \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} (\sigma_x \hat{p}_z - \sigma_z \hat{p}_x), \quad (56)$$

где

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{\mathbf{p}}_\perp^2}{2m^*} + U_c(\mathbf{r}_\perp), \quad (57)$$

а m^* — эффективная масса электрона в нанопровode. Зная потенциальную энергию конфинемента $U_c(\mathbf{r}_\perp)$, можно найти собственные функции $\psi_{\perp,n}(\mathbf{r}_\perp)$ и собственные значения $E_{\perp,n}$ гамильтониана (57). Для простоты изложения мы будем считать, что при температуре системы, близкой к нулю ($T = 0$ К), все электроны в нанопровode находятся на уровне с $n = 0$. Если же температура отлична от 0 К, то рассматриваемое приближение означает, что мы пренебрегаем толщиной нанопровода, т.е. $U_c(\mathbf{r}_\perp) = -|A|\delta^{(2)}(\mathbf{r}_\perp)$. Усредняя гамильтониан (56) по волновой функции $\psi_{\perp,0}(\mathbf{r}_\perp)$ и полагая $E_{\perp,0} = 0$, получаем одномерный гамильтониан электрона в нанопровode:

$$\hat{H}_{1D} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_z \hat{p}_x. \quad (58)$$

Гамильтониан (58), очевидно, коммутирует с оператором проекции спина $\hat{s}_z$. Собственные значения гамильтониана (58) равны

$$E_{1D} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x - \sigma k_{SO})^2 - E_{SO}, \quad (59)$$

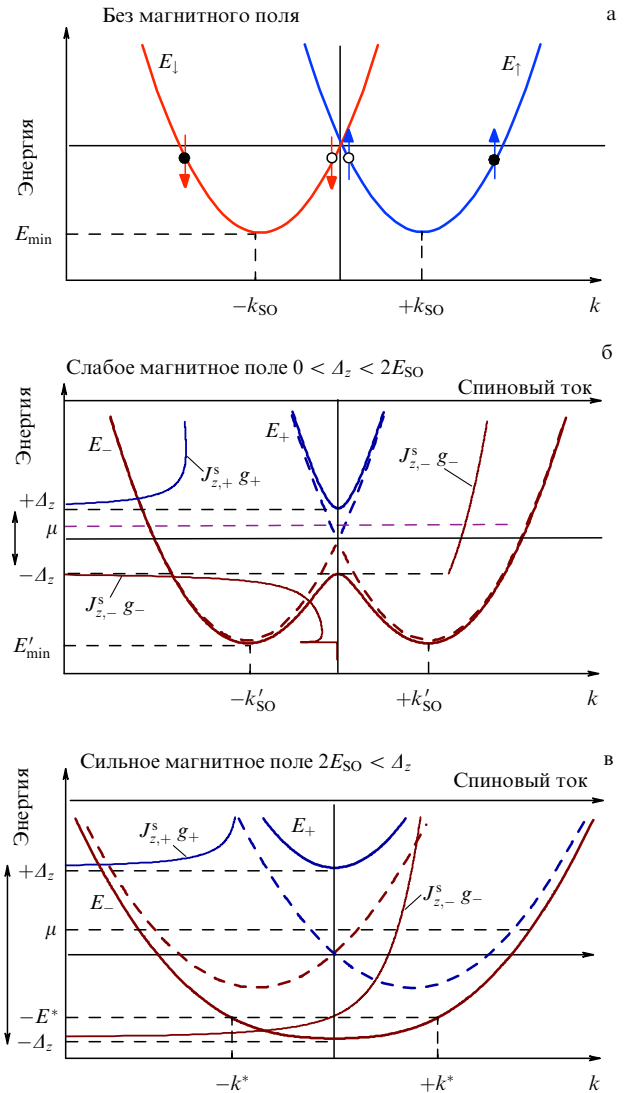


Рис. 24. Закон дисперсии электрона в бесконечно тонком нанопровode: (а) в отсутствие магнитного поля, (б) в слабом магнитном поле, (в) в сильном магнитном поле [157].

где $k_{SO} = \alpha m^* / \hbar^2$, $E_{SO} = \hbar^2 k_{SO}^2 / 2m^*$ (здесь и далее индекс SO относится к спин-орбитальному взаимодействию), а σ принимает значения $+1$ для электронов со спином "вверх" ($s_z = \hbar/2$) и -1 для электронов со спином "вниз" ($s_z = -\hbar/2$). Закон дисперсии электронов со спинами "вверх" и "вниз" представляет собой две параболы, смещённые друг относительно друга на величину $2k_{SO}$ (рис. 24а). На рисунке 25 показан закон дисперсии электронов в нанопроводах Pt–Si на поверхности Si(110), построенный по данным фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [30]. Вблизи точки Г закон дисперсии электронов хорошо согласуется с формулой (59) при $m^* = -0,66m_e$, $E_{SO} = 81$ мэВ, $k_{SO} = 0,12 \text{ \AA}^{-1}$. Отсюда получается $\alpha = 1,36 \text{ эВ \AA}$. Поскольку величины E_{SO} и k_{SO} оказались существенно больше, чем для исследованных ранее одномерных систем [159, 160], авторы статьи [30] назвали обнаруженный ими в нанопроводах Pt–Si эффект Рашбы гигантским. Позднее гигантский эффект Рашбы наблюдался ещё в ряде одномерных систем, таких как наноленты Pb на поверхности Si(553) [161], зигзагообразные цепочки Bi на поверхности InAs [162], края кластеров Bi на поверхности Si(111) [163].

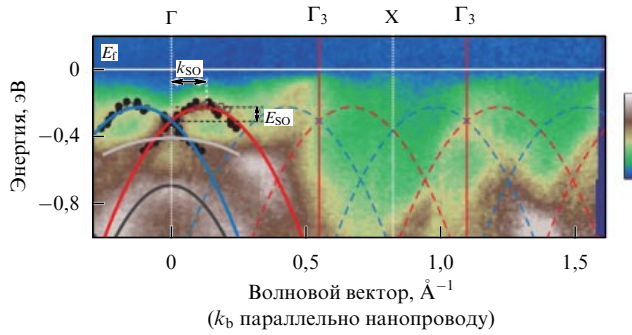


Рис. 25. (В цвете онлайн.) Эффект Рашбы в нанопроводе Pt–Si. Данные фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [30].

Рассмотрим теперь провод во внешнем магнитном поле $\mathbf{B} \neq 0$ при нулевой температуре $T = 0$ К. Для этого необходимо добавить в гамильтониан (58) слагаемое $-(\mathbf{h}\boldsymbol{\sigma})$, где $\mathbf{h} = g\mu_B\mathbf{B}/2$, μ_B — магнетон Бора, g — фактор Ланде. В результате одномерный гамильтониан электрона в нанопроводе приобретает вид

$$\hat{H}_{1D} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} - \left[\frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x + h_z \right] \sigma_z - (\mathbf{h}_\perp \boldsymbol{\sigma}_\perp), \quad (60)$$

где $\mathbf{h}_\perp = (h_x, h_y, 0)$ и $\boldsymbol{\sigma}_\perp = (\sigma_x, \sigma_y, 0)$. Видно, что ненулевая компонента магнитного поля $h_z \neq 0$ приводит к появлению в энергии (59) добавки $-\sigma h_z$, т.е. к сдвигу одной из парабол на рис. 24а вверх, а другой — вниз.

К существенно более интересным результатам приводит отличие от нуля магнитного поля $\mathbf{h}_\perp \neq 0$. Далее, следуя работе [157], будем считать, что магнитное поле направлено вдоль нанопровода, т.е. $\mathbf{h}_\perp = (h_x, 0, 0)$. Тогда две ветви закона дисперсии электрона не будут больше пересекаться, при $k_x = 0$ появится щель шириной $2\Delta_z$, где $\Delta_z = |h_x| = |g\mu_B B_x/2|$. При этом следует различать два случая. При $\Delta_z < 2E_{SO}$ эффект Рашбы превышает эффект Зеемана (рис. 24б). В этом случае уменьшается волновое число, соответствующее минимумам энергии,

$$k'_{SO} = k_{SO} \sqrt{1 - \frac{\Delta_z^2}{4E_{SO}^2}},$$

и увеличивается глубина минимумов

$$E'_{\min} = -E_{SO} \left(1 + \frac{\Delta_z^2}{4E_{SO}^2} \right).$$

В обратном случае $\Delta_z > 2E_{SO}$ эффект Зеемана превышает эффект Рашбы (рис. 24б), и закон дисперсии электрона имеет единственный минимум при $k_x = 0$, а именно $E'_{\min} = -\Delta_z$.

Наиболее интересным результатом работы [157] является предсказание ненулевой спиновой поляризации $\mathbf{P}$ и спинового тока $\mathbf{J}^s$ в ненулевом магнитном поле $\mathbf{h}_\perp = (h_x, 0, 0)$. Как и следует ожидать, электроны оказываются поляризованными в направлении магнитного поля, т.е. $\mathbf{P} = (P_x, 0, 0)$, где

$$P_x = \frac{1}{\rho} \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{h_x [f(E_-(k_x)) - f(E_+(k_x))]}{\sqrt{(\alpha k_x)^2 + h_x^2}}. \quad (61)$$

Здесь ρ — концентрация электронов, $f(E) = \{1 + \exp[(E - \mu)/k_B T]\}^{-1}$ — распределение Ферми —

Дирака, а

$$E_\pm(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \pm \sqrt{(\alpha k_x)^2 + h_x^2}.$$

В то же время оказывается, что спиновый ток направлен перпендикулярно внешнему магнитному полю: $\mathbf{J}^s = (0, 0, J_z^s)$, где

$$J_z^s = - \sum_{b=\pm} \int \frac{dk_x}{2\pi} \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{b\hbar^2}{2m^*} \frac{\alpha k_x^2}{\sqrt{(\alpha k_x)^2 + h_x^2}} \right) f(E_b(k_x)). \quad (62)$$

Эту величину удобно записать в виде спектрального разложения

$$J_z^s = \int dE \left(\sum_{b=\pm} J_{z,b}^s(E) g_b(E) \right) f(E), \quad (63)$$

где

$$g_\pm(E) = \int \frac{dk_x}{2\pi} \delta(E - E_\pm(k_x)) \quad (64)$$

является плотностью состояний электрона со спином "вверх" или "вниз". Функции $J_{z,+}^s(E)g_+(E)$ и $J_{z,-}^s(E)g_-(E)$ показаны на рис. 24б, в тонкими сплошными линиями. Стоит обратить внимание на то, что вид функции $J_{z,-}^s(E)g_-(E)$ существенно зависит от величины магнитного поля.

Посмотрим теперь, к чему приводит учёт конечной длины нанопровода. Будем считать, что нанопровод длиной L_w расположен между двумя электродами, как показано на рис. 23б. Предполагается, что спин-орбитальное взаимодействие, приводящее к эффекту Рашбы, в электродах отсутствует. Поэтому величина α теперь будет зависеть от координаты x вдоль нанопровода. Подставляя функцию $\alpha(x)$ в выражение для обобщённого гамильтониана Рашбы (55), получаем вместо (60) следующий одномерный гамильтониан:

$$\hat{H}_{1D} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} - \left[\frac{\{\alpha(x), \hat{p}_x\}}{2\hbar} + h_z \right] \sigma_z - (\mathbf{h}_\perp \boldsymbol{\sigma}_\perp), \quad (65)$$

где $\{\dots\}$ — антикоммутатор функции $\alpha(x)$ и оператора $\hat{p}_x$. В качестве функции $\alpha(x)$ можно взять любую модельную функцию, плавно изменяющуюся от нуля в области электродов до $\alpha_0 = \text{const}$ внутри нанопровода. Следуя работе [157], выберем функцию $\alpha(x)$ в виде

$$\alpha(x) = \frac{\alpha_0}{2} \left[\text{Erf} \left(\frac{L_w/2 + x}{\sqrt{2}\lambda} \right) + \text{Erf} \left(\frac{L_w/2 - x}{\sqrt{2}\lambda} \right) \right], \quad (66)$$

где λ — ширина области "включения" спин-орбитального взаимодействия на границах электрод–нанопровод.

На рисунке 26 показаны зависимости от координаты спиновой поляризации электрона $\mathbf{P}$, проекции спинового тока J_z^s и момента силы T_z^h , действующей на электрон со стороны магнитного поля, для случаев короткого ($L_w = 200$ нм) и длинного ($L_w = 2$ мкм) нанопроводов. Ширина области "включения" спин-орбитального взаимодействия в обоих случаях равна $\lambda = 20$ нм. Видно, что учёт конечной длины нанопровода приводит к следующим эффектам. Во-первых, вблизи электродов электро-

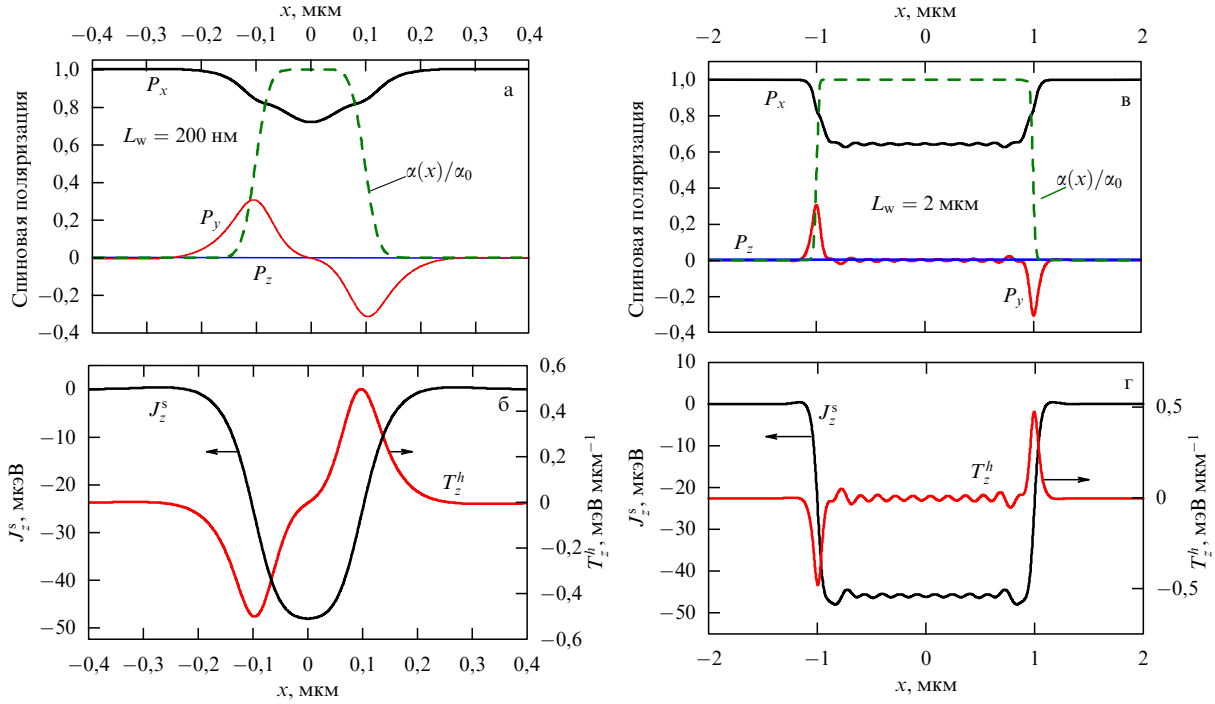


Рис. 26. Зависимость спиновой поляризации электронов (а, в), плотностей спинного тока J_z^s и момента силы T_z^h , действующей на электрон со стороны магнитного поля (б, г), от координаты. Оси координат показаны на рис. 23а. (а, б) Нанопровод длиной 200 нм, (в, г) нанопровод длиной 2 мкм. Параметры модели: $\Delta_z = 0,4$ мэВ, $\mu = -0,2$ мэВ, $T = 50$ мК, $\lambda = 20$ нм, величина α_0 соответствует случаю $E_{SO} = 0,3$ мэВ и $m^* = 0,015m_e$ [157].

ны оказываются поляризованными в направлении y , перпендикулярном как внешнему магнитному полю $\mathbf{h} = (h_x, 0, 0)$, так и оси z , вдоль которой действует эффективное поле, связанное со спин-орбитальным взаимодействием. Отличная от нуля спиновая поляризация P_y приводит в свою очередь к отличному от нуля моменту силы $\mathbf{T}^h = \rho[\mathbf{P} \times \mathbf{h}]$, действующей на электрон со стороны магнитного поля:

$$T_z^h = -\rho P_y h_x. \quad (67)$$

Во-вторых, поскольку электрон в нанопроводе оказывается локализован в области длины L_w , то наблюдаются осцилляции спиновой поляризации P_x и проекции спинного тока J_z^s . Длину этих осцилляций можно оценить по формуле

$$\lambda_{osc} \approx \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m^*}} \left(\mu + 2E_{SO} + \sqrt{4\mu E_{SO} + 4E_{SO}^2 + \Delta_z^2} \right)^{-1/2}. \quad (68)$$

При подстановке в формулу (68) параметров, приведённых в подписи к рис. 26, получаем $\lambda_{osc} \approx 165$ нм. Для короткого нанопровода оказывается что $\lambda_{osc} \sim L_w$, и осцилляции не наблюдаются. В-третьих, мы видим, что спиновая поляризация проникает из нанопровода в глубь электродов, причём характер этого проникновения существенно зависит от соотношения между химическим потенциалом μ и величиной Δ_z [157].

Теперь обсудим, к чему приводит учёт конечной ширины нанопровода при ненулевой температуре. Следуя работе [164], рассмотрим плоский нанопровод с квадратичным потенциалом вдоль оси z :

$$U_c(\mathbf{r}_\perp) = -|A|\delta(y) \frac{m^* \omega^2 z^2}{2}. \quad (69)$$

Собственные функции и собственные значения гамильтониана (57) имеют вид $E_{\perp,n} = \hbar\omega(2n+1)/2 + E_\delta$ и $\psi_{\perp,n}(\mathbf{r}_\perp) = \psi_n(z)\phi(y)$, где $\psi_n(z)$ — волновые функции одномерного гармонического осциллятора, а $\phi(y)$ и E_δ — волновая функция и энергия частицы в δ -образной яме. Далее будем отсчитывать энергию от уровня E_δ , т.е. положим $E_\delta = 0$. Усредняя гамильтониан (56) по волновой функции $\phi(y)$, получим двумерный гамильтониан электрона в нанопроводе:

$$\hat{H}_{2D} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_z \hat{p}_x + \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{m^2 \omega^2 z^2}{2} + \hat{H}_{mix}, \quad (70)$$

где

$$\hat{H}_{mix} = \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_z \sigma_x. \quad (71)$$

Гамильтониан $\hat{H}_0 = \hat{H}_{2D} - \hat{H}_{mix}$ коммутирует с оператором проекции спина σ_z , и его собственные значения равны

$$E_{0,n} = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n \right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x - \sigma k_{SO})^2 - E_{SO}, \quad (72)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ — натуральные числа. Итак, мы получаем набор из $2n$ пересекающихся парабол с минимумами в точках $\pm k_{SO}$. Учёт гамильтониана $\hat{H}_{mix}$ приводит к перемешиванию состояний, отвечающих различным значениям числа n . Если учитывать только состояния с $n = 0, 1$, то для нижних ветвей закона дисперсии электрона можно получить следующее выражение [164]:

$$E_{0,\sigma}(k_x) \approx E_{SO} + \frac{\hbar\omega}{2} \times \left[2 + (k_x l_\omega)^2 - \sqrt{(1 - 2\sigma k_{SO} k_x l_\omega)^2 + 2(k_{SO} l_\omega)^2} \right], \quad (73)$$

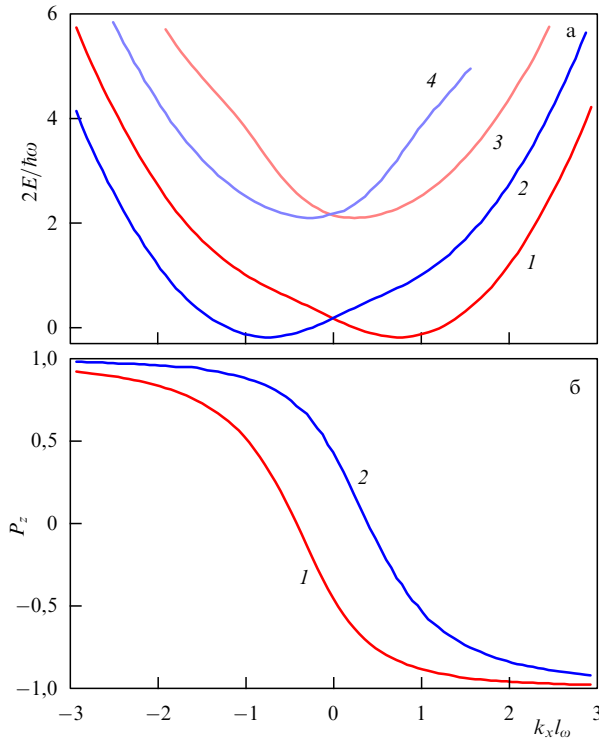


Рис. 27. Закон дисперсии $2(E(k_x) - E_{SO})/\hbar\omega$ (а) и спиновая поляризация электронов (б) в бесконечно длинном проводе при учёте конечности его толщины ($k_{SO}l_\omega = 0,9$) [164].

где $l_\omega = \sqrt{\hbar/m^*\omega}$. Закон дисперсии электрона, установленный численно с учётом всех возможных n , показан на рис. 27а. Видно, что перемешивание состояний с различными квантовыми числами n приводит к тому, что закон дисперсии перестаёт быть параболическим. Поскольку число ветвей закона дисперсии при этом сохраняется, то их по-прежнему можно нумеровать с помощью квантовых чисел n и σ . Так, кривая (1) соответствует квантовым числам $n = 0$ и $\sigma = 1$, кривая (2) — числам $n = 0$ и $\sigma = -1$, кривая (3) — числам $n = 1$ и $\sigma = 1$ и кривая (4) — числам $n = 1$ и $\sigma = -1$. Однако наиболее интересный результат перемешивания состояний заключается в том, что у электронов появляется отличная от нуля спиновая поляризация P_z (рис. 27б). В результате электроны, движущиеся вдоль нанопровода в противоположных направлениях, оказываются по-разному поляризованными, т.е. ток в нанопровode оказывается спин-поляризованным.

Электрический ток, протекающий через нанопровод в баллистическом режиме, может быть вычислен по формуле Ландауэра [26, 166, 167]

$$I_{\sigma\sigma'} = \frac{2e}{h} \sum_{m=1}^M \int_0^\infty dE T_{\sigma\sigma'}^m(E) [f_s(E, \mu_s) - f_d(E, \mu_d)], \quad (74)$$

где $T_{\sigma\sigma'}^m(E)$ — коэффициенты пропускания электронов, $f_s(E, \mu_s)$ и $f_d(E, \mu_d)$ — функции распределения Ферми — Дирака с химическими потенциалами μ_s и μ_d в истоке (s) и стоке (d) электронов, σ и σ' — спиновые индексы электронов в истоке и стоке. Из формулы (74) видно, что электрический ток через нанопровод можно изменять, "настраивая" коэффициенты пропускания $T_{\sigma\sigma'}^m(E)$. На этой идее базируется принцип работы полевого транзистора на основе нанопровода [158]. Схематиче-

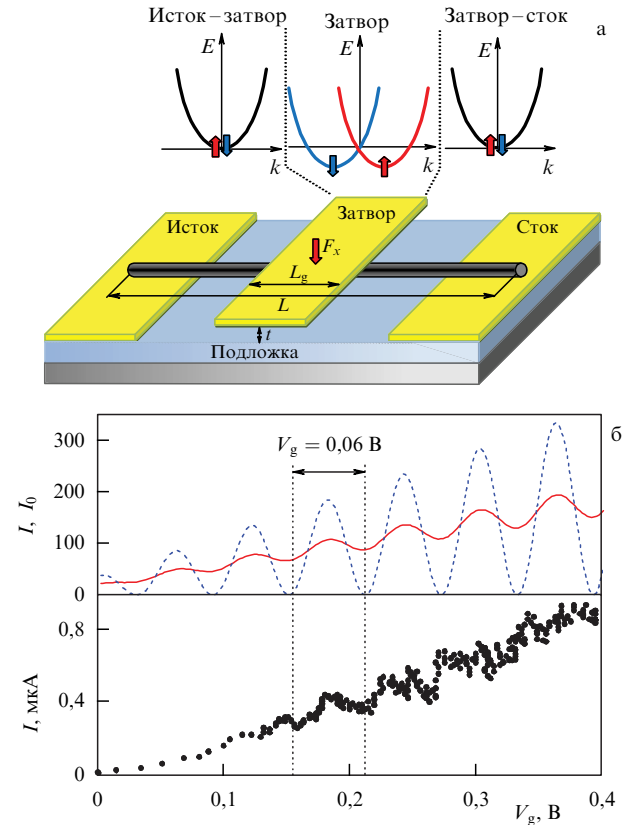


Рис. 28. (а) Схематическое изображение полевого транзистора на основе нанопровода (НП) с эффектом Рашбы. (б) Осцилляции тока в зависимости от напряжения на затворе. На верхнем рисунке показаны результаты теоретических расчётов [158] для случаев полностью поляризованного тока ($P = 1$, штриховая кривая) и частично поляризованного тока ($P = 0,4$, сплошная кривая). На нижнем рисунке показаны экспериментальные результаты [165].

ское изображение такого транзистора представлено на рис. 28а. В формуле (55) к потенциальной энергии $U(\mathbf{r})$ должны быть добавлены ещё два слагаемых: $U_{E\parallel} = eE_{\parallel}x$ и $U_{E\perp} = eg(x)E_{\perp}y$, где $E_{\parallel}$ и $E_{\perp}$ — проекции напряжённости электрического поля на оси x и y , функция $g(x)$ плавно изменяется от 0 до 1 на краях затвора. В результате коэффициенты пропускания $T_{\sigma\sigma'}^m(E)$ оказываются зависящими от величины внешнего электрического поля $E_{\perp}$. Наличие эффекта Рашбы в нанопровode приводит к частичной спиновой поляризации электрического тока, причём зависимость коэффициентов пропускания $T_{\sigma\sigma'}^m(E)$ от напряжения на затворе оказывается осциллирующей. Это приводит к тому, что и зависимость полного тока через нанопровод от напряжения на затворе также оказывается осциллирующей. На рисунке 28б приведено сравнение теоретических [158] и экспериментальных [165] зависимостей тока через нанопровод от напряжения на затворе. Как видно из рисунка, теоретические и экспериментальные данные хорошо согласуются друг с другом в случае частично поляризованного тока ($P = 0,4$).

Зависимость электропроводности G и теплопроводности K нанопроводов с эффектом Рашбы от напряжённости продольного поля $E_{\parallel}$ в баллистическом режиме исследована в работе [168]. При увеличении $E_{\parallel}$ как электропроводность, так и теплопроводность нанопроводов меняются скачками на величины $G_0 = e^2/h$ (квант

электропроводности) и $K_0 = \pi^2 k_B^2 T / 3h$ (квант теплопроводности). При этом отличие от закона Видемана – Франца ($K/K_0 = G/G_0$) наблюдается только в узкой области вблизи скачков электропроводности. Важно отметить, что при различных направлениях внешнего магнитного поля зависимости коэффициентов G и K от $E_{||}$ могут быть либо монотонными ($\mathbf{h} = (0, 0, h_z)$), либо немонотонными ($\mathbf{h} = (h_x, h_y, 0)$).

5.5. Магнитные свойства атомных проводов и цепочек

Исследование магнитных свойств атомных цепочек мотивировано в основном перспективами создания носителей информации нового поколения [169 – 171]. Для того чтобы атомную цепочку можно было использовать в качестве бита информации, необходимо, чтобы время спонтанного перемагничивания цепочки было достаточно велико. Возможность создания таких элементов памяти [172] появилась после обнаружения гигантской магнитной анизотропии атомов Со на поверхности Pt(997) с помощью метода рентгеновского магнитного кругового дихроизма [9, 173] и сканирующей туннельной микроскопии [174 – 176]. На рисунке 29 показаны кривые намагничивания для атомных цепочек Со на вицинальной поверхности Pt(997) для двух температур. При низкой температуре (рис. 29б) атомные цепочки являются ферромагнитными. Аналогичное поведение наблюдается и для эпитаксиальной системы Fe/Cu(111) [51, 177]. При этом критическая температура T_C и время τ спонтанного перемагничивания возрастают с длиной цепочек. Согласно оценке [173], цепочка из 400 атомов Со может представлять собой стабильный при комнатной температуре бит. Для увеличения плотности записи информации можно было бы использовать двойные или тройные ферромагнитные цепочки [178, 179]. Однако экспериментальные и теоретические работы показали, что при увеличении ширины цепочки энергия магнитной анизотропии существенно уменьшается, приближаясь к величине энергии магнитной анизотропии (ЭМА), характерной для монослоя [178, 180, 181]. Эти данные согласуются с известным эффектом уменьшения ЭМА атомов в кластере при увеличении его размера [182 – 184].

Другим возможным способом записи бита информации является использование антиферромагнитных цепочек [185 – 188]. Антиферромагнитные цепочки слабее взаимодействуют друг с другом, чем ферромагнитные. Поэтому использование антиферромагнитных цепочек может привести к существенному увеличению плотности записи информации. Возможность создания и перемагничивания таких цепочек с помощью СТМ была продемонстрирована на примере цепочек из атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ [2, 189]. Систематическое исследование цепочек переходных металлов на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ показало, что они могут быть как ферромагнитными, так и антиферромагнитными [190 – 194]. Похожие результаты были получены для атомных цепочек на поверхности $\text{Cu}_2\text{O}/\text{Cu}(001)$ [195]. Существенного увеличения стабильности бита можно добиться при использовании двойных антиферромагнитных цепочек [2]. На рисунках 30а–в показаны СТМ-изображения двойных цепочек из атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ для температур 1,6, 3,0 и 5,0 К соответственно. Видно, что цепочка из восьми атомов Fe находится в антиферромагнитном состоянии при температуре ниже 1,2 К, а цепочка из 12 атомов Fe — при температуре ниже 3,0 К. На рисунке 30д в логарифмической шкале показаны зависимости частоты ν спонтанного перемагничивания цепочек от температуры. Видно, что эти зависимости состоят из двух участков. При низких температурах $\nu = \text{const}$. Независимость частоты перемагничивания от температуры означает, что переход между двумя основными состояниями цепочки происходит за счёт квантово-механического туннелирования. При более высоких температурах зависимость $\nu(T)$ описывается классическим законом Аррениуса $\ln \nu \sim 1/T$, т.е. магнитные моменты атомов Fe ведут себя как классические векторы.

Взаимодействие атомов цепочки друг с другом, с атомами поверхности и внешним магнитным полем можно описать в виде эффективного гамильтониана

$$H = H_{\text{exch}} + H_{\text{MAE}} + H_B, \quad (75)$$

где первое слагаемое H_{exch} описывает обменное взаимодействие между атомами магнитной цепочки. В низшем

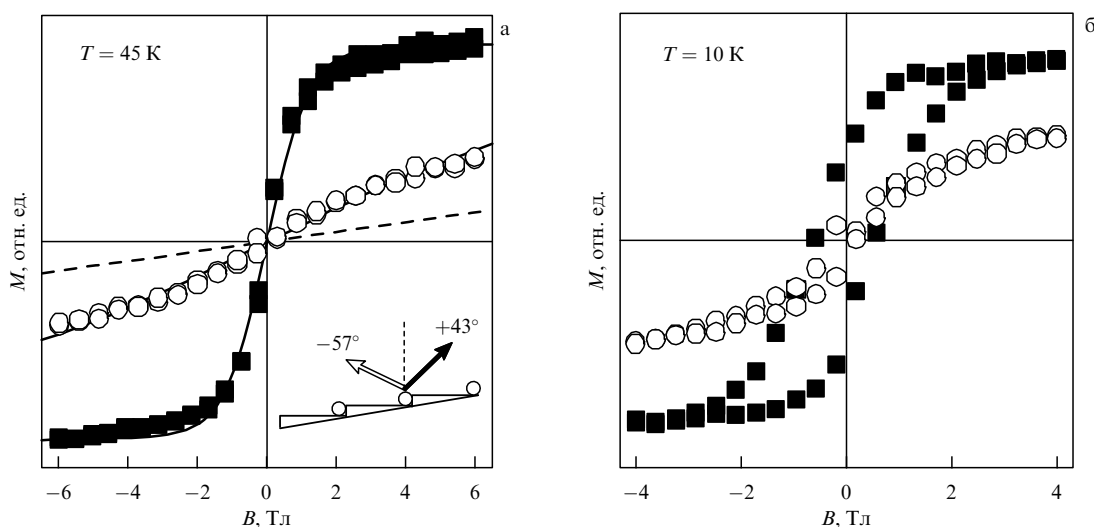


Рис. 29. Кривые намагничивания поверхности при двух различных направлениях намагничивания: $+43^\circ$ к нормали к поверхности (чёрные квадраты), -57° к нормали к поверхности (белые кружки) для температур 45 К (а) и 10 К (б) [9].

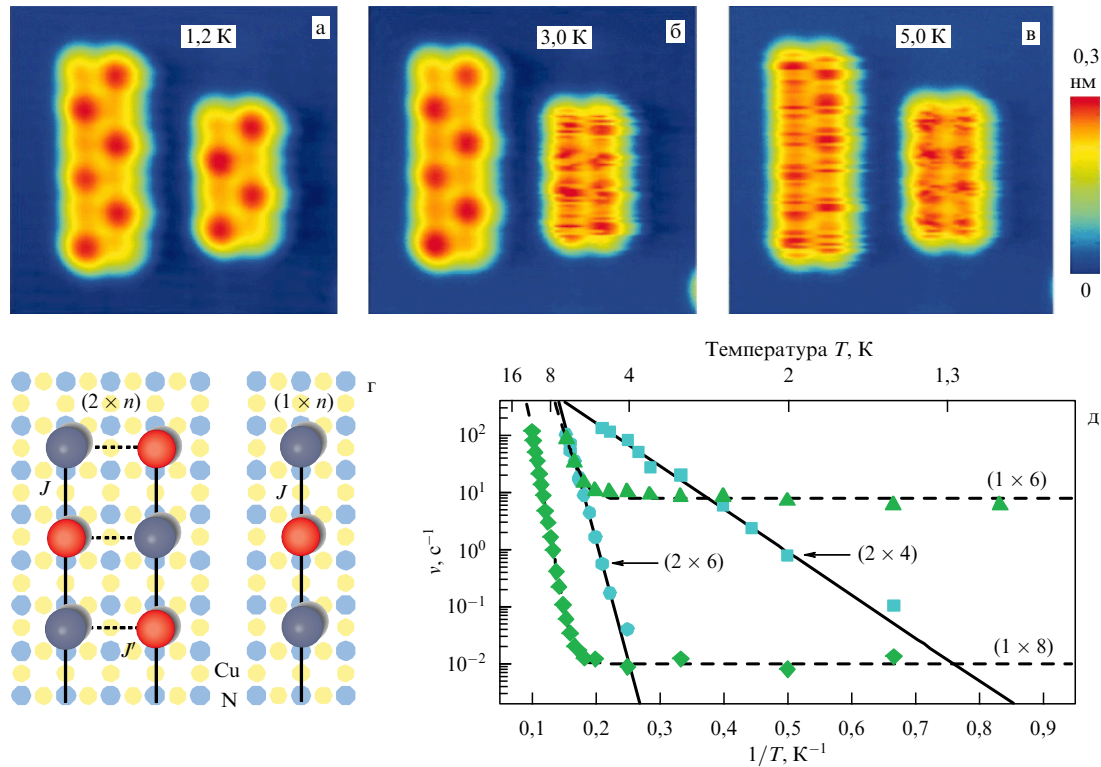


Рис. 30. (а–в) Спин-поляризованные СТМ-изображения [2] двойных антиферромагнитных цепочек из 12 (слева) и 8 (справа) атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ при температурах 1,2, 3,0 и 5,0 К соответственно. (г) Схематическое изображение двойной и одинарной антиферромагнитной цепочки на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$, где n — число атомов. (д) Зависимости частоты спонтанного перемагничивания цепочек от температуры.

порядке по проекциям спинов $(s_i)_\alpha$ гамильтониан H_{exch} представляет собой квадратичную форму [196, 197]

$$H_{\text{exch}} = - \sum_{i>j} \sum_{\alpha\beta} (s_i)_\alpha (\hat{J}_{ij})_{\alpha\beta} (s_j)_\beta, \quad (76)$$

где индексы i и j нумеруют атомы, а $\alpha, \beta = 1, 2, 3$. Этот гамильтониан можно представить в виде суммы трёх слагаемых:

$$H_{\text{exch}} = - \sum_{i>j} J_{ij} (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j) + \sum_{i>j} (\mathbf{D}_{ij} [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j]) - \sum_{i>j} \sum_{\alpha\beta} (s_i)_\alpha (\hat{J}_{ij}^{\text{aniso}})_{\alpha\beta} (s_j)_\beta. \quad (77)$$

Здесь первое слагаемое — это обычный гамильтониан Гейзенберга. Наибольший вклад в него вносит обменное взаимодействие между ближайшими соседями. Часто можно считать, что $J_{ij} = J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$, где $J > 0$ для ферромагнитной цепочки и $J < 0$ для антиферромагнитной. Второе слагаемое в (77) называется взаимодействием Дзялошинского–Мория [198, 199]. В атомных цепочках взаимодействие Дзялошинского–Мория может приводить к формированию спиральной магнитной структуры [200, 201]. Последнее слагаемое в (77) представляет симметричную анизотропную часть обменного взаимодействия $(\hat{J}_{ij}^{\text{aniso}})_{\alpha\beta} = [(\hat{J}_{ij})_{\alpha\beta} + (\hat{J}_{ij})_{\beta\alpha}]/2 - J_{ij}$ и обычно оказывается существенно меньше, чем первые два. При желании к квадратичной форме (76) можно добавлять слагаемые более высокого чётного порядка по $(s_i)_\alpha$.

Слагаемое H_{MAE} в гамильтониане (75) описывает взаимодействие атомов цепочки с атомами поверхности и называется энергией магнитной анизотропии. В большинстве практически значимых случаев гамильтониан H_{MAE} имеет вид

$$H_{\text{MAE}} = \sum_i \left[-K(s_i)_z^2 + E((s_i)_x^2 - (s_i)_y^2) \right], \quad (78)$$

где ось z совпадает с осью лёгкого намагничивания. Второе слагаемое в гамильтониане (78) связано с анизотропией поверхности, на которой расположена цепочка атомов, и, как правило, существенно меньше первого $|E| \ll |K|$. Для изотропных поверхностей $E = 0$.

Последнее слагаемое в гамильтониане (75) описывает взаимодействие атомов цепочки с внешним магнитным полем и имеет вид

$$H_{\text{B}} = - \sum_i \mu_i (\mathbf{s}_i \mathbf{B}), \quad (79)$$

где μ_i — магнитный момент i -го атома цепочки, $\mathbf{B}$ — магнитная индукция внешнего поля.

При изучении свойств отдельных атомов используются квантово-механические методы, такие как теория функционала плотности [179, 195, 202] и метод многократного рассеяния Корринги–Кона–Ростокера (ККР) [175, 203]. Используя эти методы, можно вычислить все параметры эффективного гамильтониана (75). Ниже мы обсудим применение квантово-механических методов к исследованию магнитных свойств цепочек на примере цепочек из атомов Co и Fe. В работе [184] было показано, что

спиновый магнитный момент атомов Fe ($2,7 \mu_B$), погружённых в первый слой поверхности Cu(001), примерно в полтора раза больше, чем у атомов Co ($1,7 \mu_B$), причём спиновые моменты атомов в цепочках оказываются несколько больше, чем у адатомов. Увеличение спинового магнитного момента в цепочках происходит вследствие уширения плотности d-состояний из-за взаимодействия магнитных атомов друг с другом [183]. Значения спиновых магнитных моментов не сильно меняются при релаксации поверхности и находятся в хорошем согласии с результатами [183, 204], полученными без её учёта. Отметим, что анизотропия спинового магнитного момента погружённых атомов Fe и Co пренебрежимо мала.

В отличие от спинового магнитного момента, анизотропия орбитального магнитного момента достаточно велика [184]. Например, орбитальный магнитный момент крайнего атома в цепочке из четырёх атомов Co равен $0,42 \mu_B$ при намагничивании вдоль цепочки и $0,19 \mu_B$ при намагничивании перпендикулярно плоскости поверхности, в которой лежит цепочка. Это связано с тем, что для переходных металлов с d-подоболочкой, заполненной больше чем наполовину, проекция орбитального момента на ось лёгкого намагничивания, как правило, оказывается максимальной [205]. При этом орбитальный магнитный момент магнитных атомов уменьшается за счёт их взаимодействия друг с другом. Важно отметить, что учёт релаксации поверхности приводит к существенному уменьшению орбитальных магнитных моментов погружённых атомов кобальта [183].

В таблице приведены средние энергии магнитной анизотропии на атом $\Delta E(I, z)$ ($I = x, y$), вычисленные как разность полных энергий всех атомов в случае, когда магнитные моменты магнитных атомов (Fe, Co) направлены по осям I и z . Положительное значение ЭМА $\Delta E(I, z)$ означает, что намагничивание атомов примеси вдоль оси z является энергетически более выгодным; отрицательное, наоборот, показывает, что более предпочтительной является ось I . Энергия магнитной анизотропии погружённых атомов кобальта на 1–2 порядка больше, чем у атомов железа, входящих в аналогичные цепочки. При этом аналогичные цепочки из атомов Fe и Co (за исключением адатомов) имеют разное направление осей лёгкого намагничивания. Необходимо отметить критическую роль релаксации поверхности меди при вычислении ЭМА погружённых наноструктур. Если пренебречь эффектом релаксации поверхности и выполнить расчёт ЭМА, считая, что атомы Co находятся в узлах идеальной кристаллической решётки меди, то ЭМА может увеличиться более чем в два раза [183]. К ещё более существенным отличиям приводит учёт релаксации при вычислении ЭМА для цепочек из атомов железа. Так, в работе [204] без учёта релаксации поверхности

Таблица. Средние значения ЭМА для адатомов и коротких цепочек в первом поверхностном слое Cu(100). Все значения приведены в единицах мЭВ на атом. Ось z направлена перпендикулярно поверхности, оси x и y лежат в плоскости поверхности, причём ось x — вдоль цепочек [184]

Конфигурация	$\Delta E_{Fe}(x, z)$	$\Delta E_{Fe}(y, z)$	$\Delta E_{Co}(x, z)$	$\Delta E_{Co}(y, z)$
Адаом	–0,11	–0,11	–2,01	–2,01
Димер	0,14	0,10	–1,71	–1,11
Тример	0,06	0,04	–1,59	–0,94
Тетрамер	0,05	0,03	–1,68	–1,09

было показано, что ось лёгкого намагничивания линейных цепочек, погружённых в первый слой поверхности Cu(100), лежит в плоскости поверхности перпендикулярно цепочкам. Этот результат явно противоречит данным, приведённым в таблице, согласно которым ось лёгкого намагничивания перпендикулярна поверхности меди.

Зная индивидуальные магнитные свойства атомов, можно перейти к рассмотрению коллективных магнитных свойств цепочек, следующих из гамильтониана (75). Мы не будем рассматривать свойства бесконечно длинных цепочек, которые хорошо изучены и изложены во множестве учебников, монографий и обзорных статей, а сконцентрируемся на свойствах цепочек конечной длины, которые могут быть получены экспериментально. Длина таких цепочек обычно не превышает 100 атомов. Отметим, что конечность длины магнитных цепочек приводит к тому, что перестают выполняться исходные предположения ряда фундаментальных теорем, таких как теорема Мермина и Вагнера [206] об отсутствии ферромагнетизма и антиферромагнетизма в одно- и двумерной изотропной модели Гейзенберга. Это открывает широкие возможности для практического использования магнитных цепочек конечной длины.

Теоретические методы исследования магнитных свойств цепочек можно разделить на три больших класса: 1) различные квантово-механические методы, 2) классическая магнитная динамика в рамках приближения Ландау–Лифшица–Гильберта и 3) классические статистические методы на основе метода Монте-Карло.

При исследовании свойств магнитных цепочек методами квантовой механики под $(s_i)_\alpha$ надо понимать операторы проекции спина i -го атома на ось $\alpha = x, y, z$. При этом методы исследования существенно зависят от того, на какой подложке находится цепочка атомов. Как правило, в качестве подложки используется кристалл диэлектрика (или полупроводника) или металла в нормальном состоянии¹.

Если магнитная цепочка находится на поверхности диэлектрика или полупроводника, то вклад энергии магнитной анизотропии в гамильтониан (75) мал и им можно пренебречь. Таким образом, можно считать цепочку из атомов замкнутой системой и описывать её динамику с помощью аппарата волновых функций. Интересным с практической точки зрения результатом является возможность использования атомных цепочек для квантовой передачи информации [208, 209]. Причём точность передачи информации с одного конца цепочки на другой убывает достаточно медленно при увеличении её длины $\sim N^{-1/3}$, где N — число магнитных атомов в цепочке. Другим интересным явлением является электромагнитное дипольное излучение волной опрокидывания спинов в магнитной цепочке [210]. При этом оказывается, что поток энергии излучения с учётом квантовых флуктуаций поля значительно больше потока энергии в усреднённом электромагнитном поле.

Если магнитная цепочка находится на металлической поверхности, то атомы цепочки сильно взаимодействуют с поверхностным электронным газом. В этом случае магнитная цепочка является составной частью сис-

¹ Мы не рассматриваем здесь свойства магнитных цепочек на поверхности сверхпроводников (см. обзорную статью [207] и приведённые в ней ссылки по этой теме).

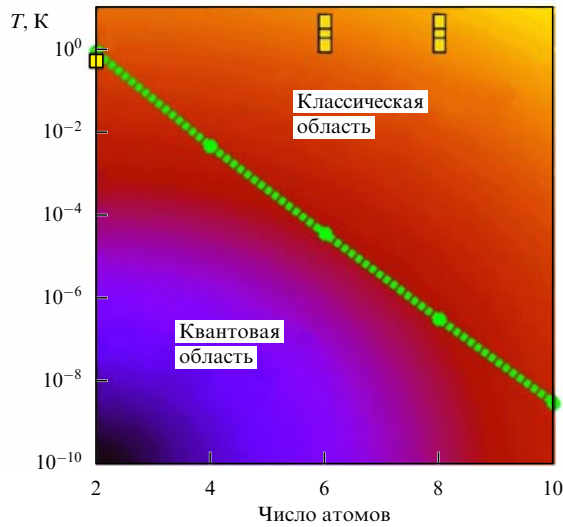


Рис. 31. Диаграмма температура–число атомов для цепочек Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ [211]. Штриховая линия разделяет области, в которых перемагничивание цепочек происходит вследствие квантово-механических осцилляций или классическим образом. Точки — экспериментальные значения из работ [2, 212].

темы цепочка + поверхность, и её состояние должно описываться на языке матриц плотности, а не волновых функций. Матрица плотности ρ магнитной цепочки является решением уравнения Линдблада [211, 213]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H_{\text{eff}}, \rho] + L[\rho], \quad (80)$$

где $L[\rho]$ — супероператор Линдблада. Последовательному выводу уравнения (80) и его совместности с законами термодинамики посвящена статья [214]. В случае антиферромагнитных цепочек Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ взаимодействие с подложкой приводит к подавлению квантово-механических осцилляций (осцилляций Раби) между двумя основными состояниями антиферромагнитной цепочки [211]. В результате перемагничивание цепочек происходит классическим образом, т.е. за счёт переворота магнитных моментов с преодолением активационного барьера. Переход между классическим и квантово-механическим режимами перемагничивания зависит от температуры и длины цепочки (рис. 31). Как видно из рис. 31, квантовые свойства магнитных цепочек проявляются только при низких температурах, ~ 1 К. В то же время с точки зрения практического применения интересна магнитная динамика цепочек при более высоких температурах. В работе [215] показано, что в классическом пределе динамика магнитной цепочки может быть описана уравнением Ландау–Лифшица–Гильберта [202, 216, 217]

$$\frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial t} = -\gamma [\mathbf{s}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] + \frac{\alpha}{\mu_i} \left[\mathbf{s}_i \times \frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial t} \right], \quad (81)$$

где $\mathbf{s}_i$ — единичный (классический) вектор магнитного момента i -го атома цепочки, γ — гиромагнитный фактор, α — константа затухания, $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$ — напряжённость эффективного магнитного поля, действующего на i -й атом:

$$\mathbf{H}_i^{\text{eff}} = -\frac{1}{\mu_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{s}_i}. \quad (82)$$

Здесь H — эффективный гамильтониан (75) магнитной цепочки.

Следует иметь в виду, что данная интерпретация уравнения (81) отличается от первоначальной интерпретации Ландау и Лифшица. При макроскопическом выводе уравнения (81) предполагается, что $\mathbf{s}$ — это единичный вектор намагниченности макроскопически малого объёма ферромагнетика, содержащего, тем не менее, большое количество атомов. Мы же полагаем, что $\mathbf{s}_i$ — это единичный вектор магнитного момента отдельного атома [202, 215].

Уравнение (81) особенно полезно при моделировании динамики перемагничивания коротких ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек во внешнем магнитном поле. В качестве примера рассмотрим перемагничивание антиферромагнитной цепочки из трёх атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ под действием СТМ-иглы и внешнего магнитного поля [202]. СТМ-игла моделировалась с помощью четвёртого атома Fe, находящегося на расстоянии $\Delta = 5$ Å от атомов цепочки. Внешнее магнитное поле представляло собой суперпозицию постоянного магнитного поля H_z , направленного перпендикулярно поверхности (вдоль оси лёгкого намагничивания), и импульсного поля $H_{\text{pls}}(t)$, направленного вдоль цепочки. В данном случае импульсное поле необходимо для активации начала перемагничивания цепочки. Оно представляет собой прямоугольный импульс амплитудой 0,3 Тл ($H_{\text{pls}} \ll |H_z|$) и длительностью 0,3 пс. На рисунке 32 показана динамика переворота крайнего атома цепочки. Время перемагничивания цепочки составляет 200–400 пс, причём минимальное поле H_z , необходимое для перемагничивания, зависит от положения СТМ-иглы.

В рассмотренном примере перемагничивание всех трёх атомов Fe происходит одновременно. В более длинных цепочках, состоящих из десятков или сотен атомов, может оказаться энергетически более выгодным механизм перемагничивания, сопровождающийся образованием доменных стенок. При этом можно считать, что магнитные моменты атомов переворачиваются случайным образом. Если предположить, что процесс переворота магнитных моментов является марковским, то можно построить кинетический метод Монте-Карло (КММК) для магнитных моментов. Рассмотрим КММК [218] для частного случая эффективного гамильтониана (75):

$$H = -\sum_{i>j} J_{ij}(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j) - K \sum_i (\mathbf{s}_i \mathbf{e})^2 - \mu \sum_i (\mathbf{s}_i \mathbf{B}), \quad (83)$$

где $\mathbf{s}_i$ и $\mathbf{e}$ — единичные векторы магнитных моментов атомов и оси лёгкого намагничивания соответственно, μ — модуль магнитного момента атома, K — энергия магнитной анизотропии, $J_{ij} = J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$ — обменный интеграл. Для ферромагнитной цепочки $J > 0$, для антиферромагнитной $J < 0$. Будем считать, что внешнее магнитное поле $\mathbf{B}$ приложено вдоль оси лёгкого намагничивания $\mathbf{e}$. Тогда магнитные моменты атомов могут быть направлены либо параллельно, либо антипараллельно оси лёгкого намагничивания $(\mathbf{s}_i \mathbf{e}) = \pm 1$. При этом магнитный момент атома направлен "вверх", если $(\mathbf{s}_i \mathbf{e}) = 1$, и "вниз", если $(\mathbf{s}_i \mathbf{e}) = -1$.

Вращение i -го магнитного момента может происходить двумя различными способами. Если $2K > |h_i|$, где $h_i = \sum_j J_{ij}(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j) + \mu(\mathbf{s}_i \mathbf{B})$, то между начальным и конечным состоянием цепочки имеется энергетический барьер

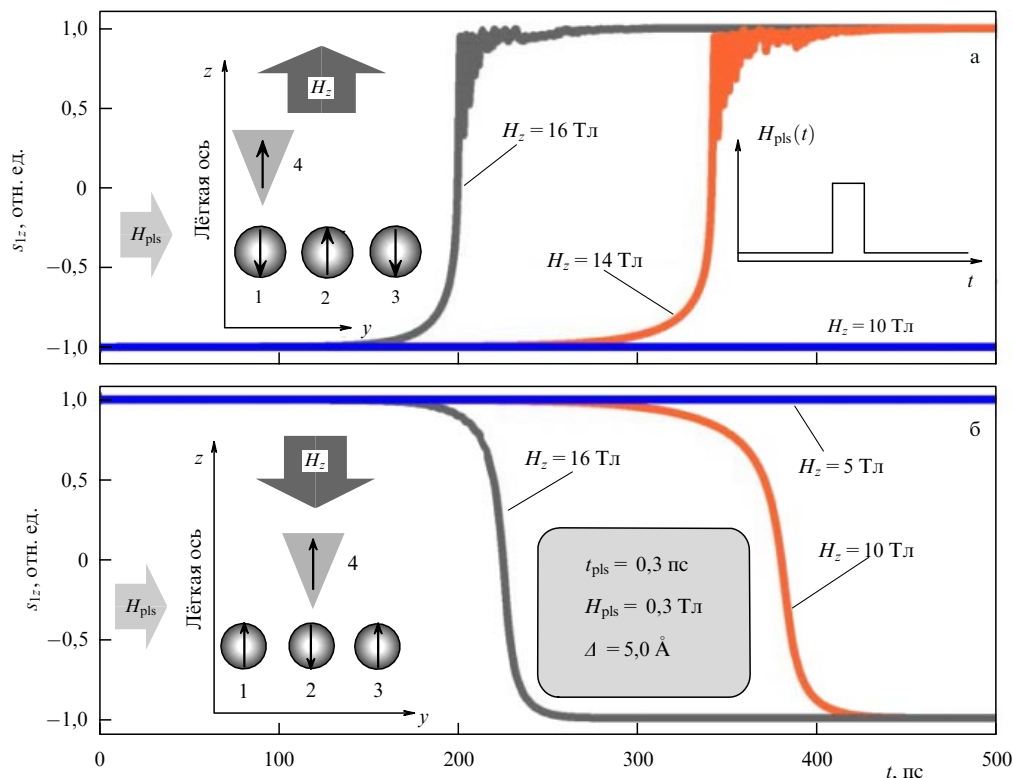


Рис. 32. Динамика перемагничивания цепочки из трёх атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ под действием СТМ-иглы и внешнего магнитного поля. Для наглядности изображена зависимость проекции s_z для крайнего атома в цепочке. Рассмотрены два положения СТМ-иглы: (а) над крайним атомом, (б) над средним атомом [202].

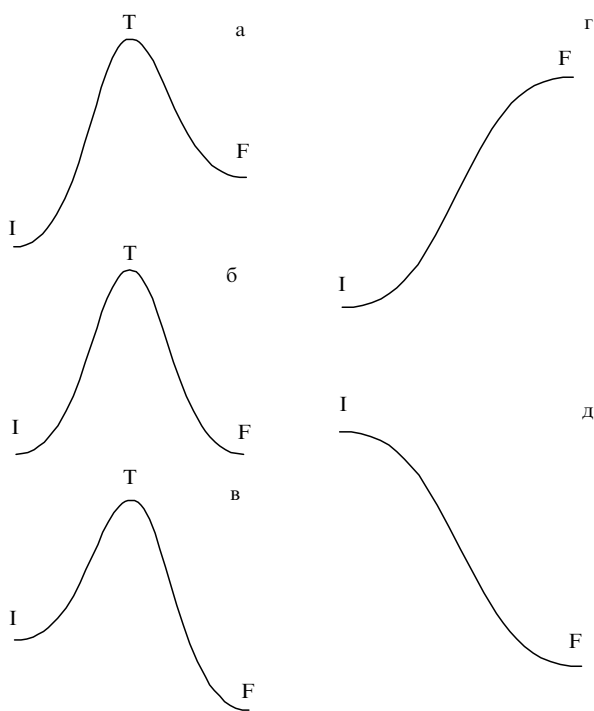


Рис. 33. Изменение энергии цепочки при перевороте одного магнитного момента из начального положения (I) в конечное положение (F) может происходить двумя способами: (а–в) с переходом через седловую точку (Т), (г, д) без преодоления энергетического барьера. (Адаптировано из [218].)

(рис. 33а–в), и частота переворотов магнитных моментов определяется выражением

$$v_i = v_0 \exp \left(-\frac{(2K + h_i)^2}{4Kk_B T} \right), \quad (84)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — температура системы и v_0 — частотный префактор. Если же $2K \leq |h_i|$, то энергетический барьер между состояниями $(\mathbf{s}_i, \mathbf{e}) = \pm 1$ отсутствует (рис. 33г, д), и частота переворотов магнитных моментов может быть вычислена [219] как

$$v_i = v_0 \frac{\exp(-2h_i/k_B T)}{1 + \exp(-2h_i/k_B T)}. \quad (85)$$

Для цепочек из атомов переходных металлов на металлических подложках частотный префактор v_0 по порядку величины равен 10^9 Гц [9].

Предложенная КММК-модель может быть использована для оценки критической температуры T_C , времени перемагничивания цепочки τ , построения кривых намагничивания цепочек и определения коэрцитивной силы [220–226]. В качестве примера на рис. 34а, б приведены кривые намагничивания цепочки из 80 атомов Со на поверхности Pt(997) при температурах 10 и 45 К. Здесь $M \in [-1, 1]$ — средняя намагниченность цепочки (в относительных единицах), усреднённая по 500 циклам перемагничивания. Видно, что при температуре 45 К коэрцитивная сила цепочки становится близкой к нулю. Однако цепочка всё ещё остаётся ферромагнитной, что видно по одинаковому углу наклона кривой намагничивания при

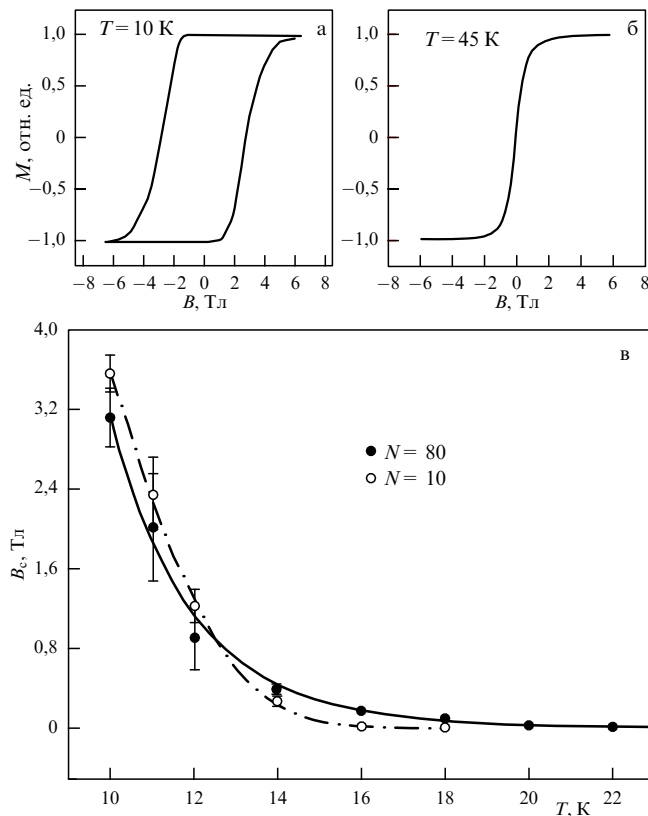


Рис. 34. Кривые намагничивания цепочки из 80 атомов Co на поверхности Pt(997) согласно результатам КММК-моделирования [218] при температуре: (а) 10 К, (б) 45 К. (в) Зависимость коэрцитивной силы цепочек из 10 и 80 атомов Co от температуры.

$M = 0$ для обеих температур. Температурная зависимость коэрцитивной силы цепочек из 10 и 80 атомов Co показана на рис. 34в. Данная зависимость хорошо аппроксимируется формулой

$$B_c = A \exp \left[- \left(\frac{T}{T_0} \right)^p \right], \quad (86)$$

где T_0 — некоторая температура ниже критической T_C . Для оценки критической температуры T_C ферромагнитной цепочки можно построить график зависимости модуля средней намагниченности $|M|$ от температуры T . Тогда критическая температура T_C определяется как точка перегиба на графике $|M|(T)$ [224, 225]. В случае антиферромагнитных цепочек можно поступить точно так же, но в качестве параметра порядка выбрать модуль разности намагниченностей двух подрешёток $|M_1 - M_2|$ [226]. Подобный способ определения критической температуры связан с тем, что для цепочек конечной длины параметр порядка не обращается в нуль ни при какой температуре.

В том случае, если параметры J и K для различных атомов цепочки различаются незначительно, можно построить на основе изложенной выше КММК-модели простой аналитический способ вычисления времени перемагничивания τ ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек [227, 228]. При температуре $T \ll T_C$ магнитные моменты всех атомов цепочки большую часть времени направлены в одну сторону. Для определённости будем считать, что все магнитные моменты направлены "вверх". Переворот магнитного момента внутри цепочки

при низкой температуре маловероятен. Поэтому перемагничивание цепочки начнётся с переворота магнитного момента одного из крайних атомов, т.е. на краю цепочки образуется доменная стенка. Если эта доменная стенка дойдёт до противоположного края цепочки, то магнитные моменты всех атомов цепочки будут направлены "вниз", т.е. цепочка перемагнитится. Если температура достаточно низкая, то за время блуждания доменной стенки вдоль цепочки вторая доменная стенка появиться не успеет. Таким образом, задача определения перемагничивания атомной цепочки конечной длины сводится к задаче о случайном блуждании одной доменной стенки. Если цепочка состоит из N атомов, то доменная стенка может находиться в одном из $N - 1$ положений между атомами $i = 1, \dots, N - 1$. Если магнитные моменты всех атомов направлены "вверх" или "вниз", то будем считать, что доменная стенка находится в положении $i = 0$ или $i = N$. Для решения задачи о случайном блуждании доменной стенки воспользуемся методом средней частоты, хорошо зарекомендовавшим себя при исследовании случайных блужданий атомов [229, 230].

Рассмотрим сначала перемагничивание атомной цепочки при отсутствии внешнего поля $\mathbf{B} = 0$. Тогда случайное блуждание доменной стенки будет характеризоваться всего тремя частотами: частотой образования доменной стенки на конце цепочки v_1 , частотой исчезновения доменной стенки на конце цепочки v_2 и частотой перемещения доменной стенки в соседнее положение внутри цепочки v_3 , которые могут быть вычислены по формулам (84) и (85).

Частоту перемещения доменной стенки из положения i в положение $j = i \pm 1$ будем обозначать $v_{i \rightarrow j}$, тогда $v_{0 \rightarrow 1} = v_{N \rightarrow N-1} = v_1$, $v_{1 \rightarrow 0} = v_{N-1 \rightarrow N} = v_2$, $v_{1 \rightarrow 2} = v_{2 \rightarrow 1} = \dots = v_{N-2 \rightarrow N-1} = v_{N-1 \rightarrow N-2} = v_3$. Обозначим τ_i^1 среднее время нахождения доменной стенки в i -м положении. Очевидно, что $\tau_0^1 = \tau_N^1 = 1/v_1$, $\tau_1^1 = \tau_{N-1}^1 = 1/(v_2 + v_3)$, $\tau_2^1 = \dots = \tau_{N-2}^1 = 1/2v_3$.

Будем считать, что в начальный момент времени доменная стенка находилась в положении $i = 0$. Нам нужно вычислить среднее время, за которое доменная стенка перейдёт в положение $i = N$. Для этого введём матрицу переходов T размером $N \times N$, элементы которой равны

$$T_{ij} = \tau_j^1 v_{j \rightarrow i}. \quad (87)$$

Поскольку в начальный момент времени доменная стенка находится в положении $i = 0$, то вероятность её обнаружения в первых N положениях равна $P_i^{\text{init}} = \delta_{0i}$. Вероятность P_i обнаружения доменной стенки в i -м положении после большого числа случайных перемещений может быть найдена из системы линейных уравнений

$$\sum_{j=0}^{N-1} (\delta_{ij} - T_{ij}) P_j = P_i^{\text{init}}. \quad (88)$$

Используя явный вид матрицы T , легко решить систему линейных уравнений (88). Тогда полное время случайного блуждания доменной стенки равно

$$\tau_{\text{tot}} = \sum_{i=0}^{N-1} \tau_i^1 P_i. \quad (89)$$

Вычисляя время τ_{tot} , мы предполагали, что доменная стенка появляется в положении $i = 0$. Однако доменная стенка может с одинаковой вероятностью появляться с

обоих концов атомной цепочки, поэтому среднее время перемагничивания цепочки τ должно быть вдвое меньше времени τ_{tot} . Из (88) и (89) после простых вычислений находим

$$\tau = \frac{1}{2a} \left\{ \frac{a}{v_3} \left(\frac{N-1}{2} \right) \left[N - \frac{2(1-2a)}{1-a} \right] + \frac{1}{v_1} [N(1-a) - 2(1-2a)] \right\}, \quad (90)$$

где $a = v_3/(v_2 + v_3)$. Выражение (90) справедливо не только для длинных, $N \gg 1$, но и для достаточно коротких, $N \sim 10$, цепочек, при выполнении условия $KN - 2J \gg k_B T$, которое гарантирует, что вероятность образования доменной стенки много больше вероятности одновременного переворота всех магнитных моментов.

Обобщим формулу (90) на случай ненулевого внешнего магнитного поля. Теперь случайное блуждание доменной стенки будет характеризоваться не тремя, а шестью частотами: $v_{1\pm}$, $v_{2\pm}$ и $v_{3\pm}$. Повторя приведённые выше вычисления, получим

$$\tau(B) = \frac{1}{2(1-a_-)} \left\{ \frac{a_-}{v_{3-}} + \frac{(N-2)(1-a_-) + (a_- - \alpha)S_{N-2}}{v_{3+}(1-\alpha)} + \frac{S_{N-2} - (a_- + \alpha a_+)S_{N-3} + \alpha a_+ S_{N-4}}{v_{1+} + \alpha} \right\}, \quad (91)$$

где $\alpha = (1-b)/b$, $S_N = (1-\alpha^N)/(1-\alpha)$, $a_+ = v_{3+}/(v_{2+} + v_{3+})$, $a_- = v_{3-}/(v_{2-} + v_{3-})$ и $b = v_{3+}/(v_{3-} + v_{3+})$. В пределе $B \rightarrow 0$ формула (91) переходит в формулу (90).

Формулу (91) можно использовать для исследования магнитодинамических свойств атомных цепочек при температуре ниже T_{max} . Если магнитная индукция B зависит от времени, $B = B(t)$, то от времени также будут зависеть и частоты перемагничивания атомной цепочки: $v_{\uparrow \rightarrow \downarrow}(t) = 1/\tau(B(t))$ и $v_{\downarrow \rightarrow \uparrow}(t) = 1/\tau(-B(t))$. При этом вероятность нахождения цепочки в состоянии, когда магнитные моменты всех атомов направлены "вверх", определяется из уравнения кинетического баланса

$$\frac{dP_{\uparrow}}{dt} = P_{\downarrow} v_{\downarrow \rightarrow \uparrow} - P_{\uparrow} v_{\uparrow \rightarrow \downarrow}, \quad (92)$$

где $P_{\uparrow} + P_{\downarrow} = 1$. Если намагниченность атомной цепочки измерять в безразмерных единицах $M \in [-1, 1]$, то $M = P_{\uparrow} - P_{\downarrow}$, и из уравнения (92) следует уравнение для намагниченности атомной цепочки

$$\frac{dM(t)}{dt} = \mathfrak{A}(t)M(t) + \mathfrak{B}(t), \quad (93)$$

где $\mathfrak{A} = -v_{\uparrow \rightarrow \downarrow} - v_{\downarrow \rightarrow \uparrow}$ и $\mathfrak{B} = v_{\downarrow \rightarrow \uparrow} - v_{\uparrow \rightarrow \downarrow}$. Уравнение (93) вместе с начальным условием $M(0) = M_0$ представляет собой задачу Коши, которая может быть решена численно.

Описанный метод может быть обобщён на случай двойных ферромагнитных или антиферромагнитных цепочек [231, 232]. При этом обменное взаимодействие между атомами внутри цепочки описывается обменным интегралом J , а взаимодействие между атомами соседних цепочек — обменным интегралом J' (рис. 30г) в случае как слабой ($J'N \lesssim J$), так и сильной ($J' \ln N \gtrsim J$) связи между цепочками. Результаты, полученные по аналитическим формулам, находятся в хорошем согласии с результатами КММК-моделирования. На рисунке 35 показаны кривые намагничивания атомной и двойной

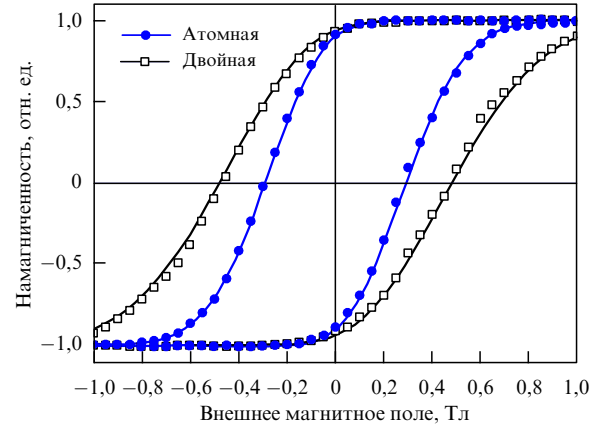


Рис. 35. Кривые намагничивания атомной и двойной ферромагнитных цепочек Co на поверхности Pt(997) [231]. Параметры эффективного гамильтониана: $N = 100$, $J = 7,5$ мэВ, $K = 2,0$ мэВ, $\mu = 2,4 \mu_B$, $T = 16$ К в случае атомной цепочки; $2N = 200$, $J = J' = 7,5$ мэВ, $K = 0,34$ мэВ, $\mu = 2,4 \mu_B$, $T = 40$ К в случае двойной цепочки. Скорость изменения внешнего магнитного поля в обоих случаях $|dB/dt| = 130$ Тл с^{-1} . Точками показаны результаты КММК-моделирования, усреднённые по 1000 циклам перемагничивания, сплошными кривыми — решения задачи Коши (93).

ферромагнитных цепочек Co на поверхности Pt(997). Видно, что результаты КММК-моделирования и численного решения задачи Коши (93) практически совпадают. При этом изложенный выше аналитический метод не требует набора статистики и, следовательно, позволяет строить кривые намагничивания несравнимо быстрее, чем КММК-моделирование.

6. Заключение

Анализ многочисленных экспериментальных данных, приведённых в настоящем обзоре, показал, что среди большого количества эпитаксиальных систем наиболее перспективными для формирования атомных цепочек являются металлические вицинальные ступенчатые поверхности, поверхности металлов и полупроводников с низкими индексами Миллера. Формирование и эволюция атомных цепочек и проводов описаны с привлечением простых теоретических моделей. Показано, что условия роста одномерных структур зависят как от эпитаксиальной системы, так и от внешних параметров. Исследования, проведённые кинетическим методом Монте-Карло, показали, что переход из одного равновесного состояния в другое при нагреве или охлаждении происходит через неравновесные состояния, поэтому распределение длин таких структур зависит от времени проведения эксперимента. Контролируя время отжига и температуру, можно управлять размерами одномерных атомных структур, а следовательно, и их свойствами.

Исследование электронных и магнитных свойств атомных цепочек выявило ряд физических процессов и явлений, важных для создания новых методов хранения и передачи информации. Так, в атомных проводах с гигантским эффектом Рашбы в ненулевом магнитном поле, направленном вдоль провода, электроны оказываются поляризованными в направлении магнитного поля. При этом учёт конечной длины провода приводит к следующим эффектам: 1) вблизи электродов электроны оказы-

ваются поляризованными в направлении, перпендикулярном как внешнему магнитному полю, так и оси, вдоль которой действует эффективное поле, связанное со спин-орбитальным взаимодействием; 2) наблюдаются осцилляции спиновой поляризации и проекции спинового тока; 3) спиновая поляризация проникает из провода в глубь электродов. При увеличении температуры происходит перемешивание состояний с различными квантовыми числами, что приводит к появлению спиновой поляризации тока, протекающего через провод даже в отсутствие магнитного поля. Кроме того, ток через провод можно изменять с помощью внешнего электрического поля, направленного перпендикулярно нанопроводу. Эти свойства атомных проводов с гигантским эффектом Рашбы позволяют использовать их для создания различных приборов, таких как полевой транзистор.

Особо следует выделить теоретические исследования магнитных свойств атомных цепочек и проводов. Это связано с тем, что только в рамках теоретических подходов можно перейти от знания индивидуальных магнитных свойств атомов к рассмотрению коллективных магнитных свойств цепочек и в дальнейшем оценить перспективность их практического применения. Теоретические методы исследования магнитных свойств атомных цепочек можно разделить на три больших класса: 1) квантово-механические методы, 2) классическая магнитная динамика в рамках приближения Ландау–Лифшица–Гильберта и 3) классические статистические методы на основе метода Монте-Карло. Каждый последующий класс методов, являясь грубым приближением предыдущего, позволяет исследовать свойства более длинных цепочек на больших временных интервалах.

Представленные результаты исследования магнитных свойств атомных цепочек указывают на их существенную зависимость от материала подложки. Как правило, в качестве неё используется кристалл диэлектрика, полупроводника или металла в нормальном состоянии. Если магнитные моменты цепочек слабо взаимодействуют с диэлектрическими подложками, то такие атомные цепочки могут быть использованы для квантовой передачи информации. Напротив, взаимодействие атомов цепочки с металлическими подложками может приводить к появлению гигантской магнитной анизотропии. А это уже открывает перспективы создания носителей информации нового поколения, где в качестве бита информации могут быть использованы как ферромагнитные, так и антиферромагнитные атомные цепочки.

Авторы благодарят всех своих коллег по работе в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова. Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (грант № 21-72-20034). С.В. Колесников принимал участие только в написании разделов 5.4 и 5.5. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 19-12-50010 ("Экспансия") и № 19-32-90045, а также при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики "БАЗИС".

Список литературы

- Hirjibehedin C F, Lutz C P, Heinrich A J *Science* **312** 1021 (2006)
- Loth S et al. *Science* **335** 196 (2012)
- Fölsch S et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 056803 (2004)
- Gambardella P et al. *Phys. Rev. B* **61** 2254 (2000)
- Gambardella P et al. *Surf. Sci.* **449** 93 (2000)
- Schoiswohl J et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 126102 (2006)
- Surnev S et al. *ChemPhysChem*. **11** 2506 (2010)
- Zaki N et al. *Phys. Rev. B* **80** 155419 (2009)
- Gambardella P et al. *Nature* **416** 301 (2002)
- Himpsel F J, Ortega J E *Phys. Rev. B* **50** 4992(R) (1994)
- Yan L et al. *Appl. Phys. Lett.* **86** 102503 (2005)
- Ferstl P et al. *Phys. Rev. Lett.* **117** 046101 (2016)
- Giovanardi C et al. *Phys. Rev. B* **78** 205416 (2008)
- Yeom H W et al. *Phys. Rev. Lett.* **82** 4898 (1999)
- Himpsel F J et al. *J. Phys. Condens. Matter* **13** 11097 (2001)
- Zandvliet H J W, van Houselt A, Poelsema B J. *Phys. Condens. Matter* **21** 474207 (2009)
- Watanabe T et al. *Surf. Sci.* **653** 71 (2016)
- Zhang L et al. *Appl. Surf. Sci.* **439** 101 (2018)
- Stekolnikov A A et al. *Phys. Rev. Lett.* **100** 196101 (2008)
- Mocking T F et al. *Nat. Commun.* **4** 2387 (2013)
- Kabanov N S et al. *Appl. Surf. Sci.* **404** 12 (2017)
- Schäfer J et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 236802 (2008)
- Oncel N et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 116801 (2005)
- Schaefer J et al. *New J. Phys.* **11** 125011 (2009)
- Aulbach J et al. *Phys. Rev. Lett.* **111** 137203 (2013)
- Datta S *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995)
- Клавсюк А Л, Салецкий А М *УФН* **185** 1009 (2015); Klavsyuk A L, Saletsky A M *Phys. Usp.* **58** 933 (2015)
- Crain J N, Pierce D T *Science* **307** 703 (2005)
- Erwin S C, Himpsel F J *Nat. Commun.* **1** 58 (2010)
- Park J et al. *Phys. Rev. Lett.* **110** 036801 (2013)
- Gambardella P et al. *Phys. Rev. B* **73** 245425 (2006)
- Yilmaz M B, Zimmermann F M *Phys. Rev. E* **71** 026127 (2005)
- Tokar V I, Dreyssé H *Phys. Rev. B* **76** 073402 (2007)
- Petrov P et al. *Appl. Math. Model.* **35** 1331 (2011)
- Tokar V I, Dreyssé H *Phys. Rev. E* **92** 062407 (2015)
- Kocán P et al. *Phys. Rev. E* **80** 061603 (2009)
- Syromyatnikov A G, Saletsky A M, Klavsyuk A L *Phys. Rev. B* **97** 235444 (2018)
- Сыромятников А Г, Клавсюк А Л, Салецкий А М *Письма в ЖЭТФ* **110** 331 (2019); Syromyatnikov A G, Saletsky A M, Klavsyuk A L *JETP Lett.* **110** 348 (2019)
- Syromyatnikov A G, Saletsky A M, Klavsyuk A L *Surf. Sci.* **693** 121528 (2020)
- Syromyatnikov A G, Saletsky A M, Klavsyuk A L *J. Magn. Magn. Mater.* **510** 166896 (2020)
- Ovesson S et al. *Phys. Rev. B* **64** 125423 (2001)
- Zaum C et al. *Phys. Rev. Lett.* **114** 146104 (2015)
- Kim S Y, Lee I H, Jun S *Phys. Rev. B* **76** 245407 (2007)
- Mińkowski M, Zaluska-Kotur M A *Surf. Sci.* **642** 22 (2015)
- Fichthorn K A, Scheffler M *Phys. Rev. Lett.* **84** 5371 (2000)
- Kuhnke K, Kern K J. *Phys. Condens. Matter* **15** S3311 (2003)
- Колесников С В "Исследование самоорганизации наноструктур на поверхности меди", Дисс. ... канд. физ.-мат. наук (М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010)
- de la Figuera J et al. *Appl. Phys. Lett.* **66** 1006 (1995)
- Chang H W et al. *J. Appl. Phys.* **100** 084304 (2006)
- Vu Q H, Morgenstern K *Phys. Rev. B* **95** 125423 (2017)
- Shen J et al. *Phys. Rev. B* **56** 2340 (1997)
- Guo J et al. *Phys. Rev. B* **73** 193405 (2006)
- Prieto J E, de la Figuera J, Miranda R *Phys. Rev. B* **62** 2126 (2000)
- Speller S et al. *Surf. Sci.* **405** L542 (1998)
- de la Figuera J et al. *Surf. Sci.* **307**–**309** 538 (1994)
- de la Figuera J et al. *Phys. Rev. B* **47** 13043 (1993)
- Mo Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 155503 (2005)
- Negulyaev N N et al. *Phys. Rev. B* **77** 085430 (2008)
- Cochrane W P. *Phys. Soc.* **48** 723 (1936)
- Pedersen M et al. *Surf. Sci.* **387** 86 (1997)
- Zaki N et al. *Phys. Rev. B* **87** 161406 (2013)
- Сыромятников А Г и др. *ЖЭТФ* **151** 160 (2017); Syromyatnikov A G et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **124** 139 (2017)
- Сыромятников А Г, Клавсюк А Л, Салецкий А М *Письма в ЖЭТФ* **100** 26 (2014); Syromyatnikov A G, Klavsyuk A L, Saletsky A M *JETP Lett.* **100** 24 (2014)
- Ding H F et al. *Phys. Rev. B* **76** 033409 (2007)
- Bellisario D O et al. *J. Phys. Chem. C* **113** 12863 (2009)

66. Syromyatnikov A, Klavskyuk A, Saletsky A *IEEE Magn. Lett.* **10** 6111003 (2019)
67. Röder H et al. *Nature* **366** 141 (1993)
68. York S M, Leible F M *Phys. Rev. B* **64** 033411 (2001)
69. Wang J T et al. *Phys. Rev. Lett.* **105** 116102 (2010)
70. Simov K R, Nolph C A, Reinke P J. *Phys. Chem. C* **116** 1670 (2012)
71. Liu H, Reinke P *Surf. Sci.* **602** 986 (2008)
72. Nolph C A, Liu H, Reinke P *Surf. Sci.* **605** L29 (2011)
73. Liu H J, Owen J H G, Miki K J. *Phys. Condens. Matter* **24** 095005 (2012)
74. Zandvliet H J W *Phys. Rep.* **388** 1 (2003)
75. Oncel N, Nicholls D J. *Phys. Condens. Matter* **25** 014010 (2012)
76. Hamers R J, Tromp R M, Demuth J E *Phys. Rev. B* **34** 5343 (1986)
77. Li Y et al. *Phys. Rev. B* **56** 12539 (1997)
78. Ferrando R, Hontinfinde F, Levi A C *Phys. Rev. B* **56** R4406 (1997)
79. Stepanyuk O V et al. *Phys. Rev. B* **78** 113406 (2008)
80. Stepanyuk O V et al. *Phys. Rev. B* **79** 155410 (2009)
81. Mottet C et al. *Surf. Sci.* **417** 220 (1998)
82. Amar J G, Popescu M N, Family F *Phys. Rev. Lett.* **86** 3092 (2001)
83. Сыромятников А Г, Клавсюк А Л, Салеский А М *Письма в ЖЭТФ* **107** 794 (2018); Syromyatnikov A G, Saletsky A M, Klavskyuk A L *JETP Lett.* **107** 766 (2018)
84. Ramadan A, Picaud F, Ramseyer C *Surf. Sci.* **604** 1576 (2010)
85. Tokar V I, Dreyssé H *Surf. Sci.* **637–638** 116 (2015)
86. Albao M A et al. *Phys. Rev. B* **72** 035426 (2005)
87. Stinchcombe R B, Araújo Reis F D A *Phys. Rev. B* **77** 035406 (2008)
88. Shi F, Shim Y, Amar J G *Phys. Rev. E* **79** 011602 (2009)
89. Javorský J et al. *Phys. Rev. B* **79** 165424 (2009)
90. Albia J R, Albao M A *Phys. Rev. E* **95** 042802 (2017)
91. González D L, Camargo M, Sánchez J A *Phys. Rev. E* **97** 052802 (2018)
92. Brune H *Surf. Sci. Rep.* **31** 125 (1998)
93. Evans J W, Thiel P A, Bartelt M C *Surf. Sci. Rep.* **61** 1 (2006)
94. Dieterich W, Einax M, Maass P *Eur. Phys. J. Special Topics* **161** 151 (2008)
95. Einax M, Dieterich W, Maass P *Rev. Mod. Phys.* **85** 921 (2013)
96. Vicsek T, Family F *Phys. Rev. Lett.* **52** 1669 (1984)
97. Bartelt M C et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 1901 (1998)
98. Bartelt M C et al. *Phys. Rev. B* **59** 3125 (1999)
99. Bartelt M C, Evans J W *Phys. Rev. B* **54** R17359 (1996)
100. Venables J A *Philos. Mag.* **27** 697 (1973)
101. Venables J A, Spiller G D T, Hanbucken M *Rep. Prog. Phys.* **47** 399 (1984)
102. Stoyanov S, Kashchiev D *Current Topics Mater. Sci.* **7** 69 (1981)
103. Walton D J. *Chem. Phys.* **37** 2182 (1962)
104. Li M, Bartelt M C, Evans J W *Phys. Rev. B* **68** 121401 (2003)
105. Li M, Evans J W *Surf. Sci.* **546** 127 (2003)
106. Li M, Evans J W *Multiscale Model. Simul.* **3** 629 (2005)
107. Дубровский В Г, Бердников Ю С, Соколова Ж В *Письма в ЖТФ* **41** (5) 74 (2015); Dubrovskii V G, Berdnikov Yu S, Sokolova Zh V *Tech. Phys. Lett.* **41** 242 (2015)
108. Dubrovskii V G, Sibirev N V *Phys. Rev. E* **91** 042408 (2015)
109. Evans J W, Bartelt M C *Phys. Rev. B* **63** 235408 (2001)
110. Körner M, Einax M, Maass P *Phys. Rev. B* **86** 085403 (2012)
111. Gibou F G et al. *Phys. Rev. B* **63** 115401 (2001)
112. Gibou F, Ratsch C, Caffisch R *Phys. Rev. B* **67** 155403 (2003)
113. Dubrovskii V G *Nucleation Theory and Growth of Nanostructures* (Berlin: Springer-Verlag, 2014)
114. Berdnikov Y, Dubrovskii V G *J. Phys. Conf. Ser.* **541** 012089 (2014)
115. Tokar V I, Dreyssé H *Phys. Rev. B* **74** 115414 (2006)
116. Amar J G, Popescu M N *Phys. Rev. B* **69** 033401 (2004)
117. Brune H et al. *Phys. Rev. B* **60** 5991 (1999)
118. Han Y et al. *Phys. Rev. B* **87** 155420 (2013)
119. Hamers R J, Köhler U K J. *Vac. Sci. Technol. A* **7** 2854 (1989)
120. Vanpoucke D E P J. *Phys. Condens. Matter* **26** 133001 (2014)
121. Lukanov B R et al. *Phys. Rev. B* **89** 155319 (2014)
122. Owen J H G et al. *Phys. Rev. Lett.* **88** 226104 (2002)
123. Vanpoucke D E P, Brocks G *Phys. Rev. B* **81** 085410 (2010)
124. Song I et al. *New J. Phys.* **11** 063034 (2009)
125. Koczorowski W et al. *Phys. Rev. B* **91** 235319 (2015)
126. Schwingenschlögl U, Schuster C *Eur. Phys. J. B* **60** 409 (2007)
127. Gurlu O et al. *Phys. Rev. B* **70** 085312 (2004)
128. Pick V et al. *J. Phys. Condens. Matter* **19** 446001 (2007)
129. Syromyatnikov A G et al. *Mater. Lett.* **179** 69 (2016)
130. Кон В *УФН* **172** 336 (2002); Kohn W *Rev. Mod. Phys.* **71** 1253 (1999)
131. Zaki N et al. *Phys. Rev. B* **89** 205427 (2014)
132. Kolesnikov S V, Klavskyuk A L, Saletsky A M *Surf. Sci.* **612** 48 (2013)
133. Schüler M et al. *New J. Phys.* **19** 073016 (2017)
134. Néel N et al. *Phys. Rev. Lett.* **107** 106804 (2011)
135. Hansen O et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 5572 (1998)
136. Биннинг Г, Рорер Г *УФН* **154** 261 (1988); Binnig G, Rohrer H *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **26** 606 (1987)
137. Metropolis N et al. *J. Chem. Phys.* **21** 1087 (1953)
138. Ising E Z. *Phys.* **31** 253 (1925)
139. Limot L et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 036805 (2005)
140. Sánchez O et al. *Phys. Rev. B* **52** 7894 (1995)
141. Hansmann M et al. *Phys. Rev. B* **67** 121409 (2003)
142. Ignatiev P A et al. *Phys. Rev. B* **75** 155428 (2007)
143. Shiraki S et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 096102 (2004)
144. Olsson F E et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 206803 (2004)
145. Давыдов С Ю, Трошин С В *ФТТ* **49** 1508 (2007); Davydov S Yu, Troshin S V *Phys. Solid State* **49** 1583 (2007)
146. Anderson P W *Phys. Rev.* **124** 41 (1961)
147. Newns D M *Phys. Rev.* **178** 1123 (1969)
148. Borisov A G, Kazansky A K, Gauyacq J P *Phys. Rev. B* **59** 10935 (1999)
149. Li J et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 4464 (1998)
150. Stepanyuk V S et al. *Phys. Rev. B* **72** 153407 (2005)
151. Lazarovits B, Szunyogh L, Weinberger P *Phys. Rev. B* **73** 045430 (2006)
152. Lounis S et al. *Phys. Rev. B* **73** 195421 (2006)
153. Nilius N, Wallis T M, Ho W *Science* **297** 1853 (2002)
154. Рашба Э И *ФТТ* **2** 1224 (1960)
155. Бычков Ю А, Рашба Э И *Письма в ЖЭТФ* **39** 66 (1984); Bychkov Yu A, Rashba E I *JETP Lett.* **39** 78 (1984)
156. Bychkov Y A, Rashba E I J. *Phys. C* **17** 6039 (1984)
157. Dolcini F, Rossi F *Phys. Rev. B* **98** 045436 (2018)
158. Wójcik P et al. *J. Appl. Phys.* **115** 104310 (2014)
159. Nitta J et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** 1335 (1997)
160. Barke I et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 226405 (2006)
161. Korpciuszyński M et al. *Sci. Rep.* **7** (1) (2017)
162. Nakamura T et al. *Phys. Rev. B* **98** 075431 (2018)
163. Takayama A et al. *Phys. Rev. Lett.* **114** 066402 (2015)
164. Governale M, Zülicke U *Phys. Rev. B* **66** 073311 (2002)
165. Yoh K et al., in *70th Device Research Conf., IEEE2012*
166. Landauer R *Philos. Mag.* **21** 863 (1970)
167. Büttiker M *Phys. Rev. Lett.* **57** 1761 (1986)
168. Koeik Z, Sakr M R *Physica E* **74** 527 (2015)
169. Sander D J. *Phys. Condens. Matter* **16** R603 (2004)
170. Enders A, Skomski R, Honolka J J. *Phys. Condens. Matter* **22** 433001 (2010)
171. Wang H et al. *Nano* **06** (01) 1 (2011)
172. Barth J V, Costantini G, Kern K *Nature* **437** 671 (2005)
173. Gambardella P *Science* **300** 1130 (2003)
174. Brune H, Gambardella P *Surf. Sci.* **603** 1812 (2009)
175. Balashov T et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 257203 (2009)
176. Bansmann J et al. *Surf. Sci. Rep.* **56** 189 (2005)
177. Shen J et al. *J. Phys. Condens. Matter* **15** R1 (2002)
178. Gambardella P et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 077203 (2004)
179. Dupé B et al. *New J. Phys.* **17** 023014 (2015)
180. Otte F, Ferriani P, Heinze S *Phys. Rev. B* **89** 205426 (2014)
181. Félix-Medina R, Dorantes-Dávila J, Pastor G M *New J. Phys.* **4** 100 (2002)
182. Martins M, Wurth W J. *Phys. Condens. Matter* **28** 503002 (2016)
183. Pick S et al. *Phys. Rev. B* **70** 224419 (2004)
184. Клавсюк А Л, Колесников С В, Салеский А М *Письма в ЖЭТФ* **99** 750 (2014); Klavskyuk A L, Kolesnikov S V, Saletsky A M *JETP Lett.* **99** 646 (2014)
185. Gomonay O et al. *Nat. Phys.* **14** 213 (2018)
186. Baltz V et al. *Rev. Mod. Phys.* **90** 015005 (2018)
187. Gomonay E V, Loktev V M *Low Temp. Phys.* **40** 17 (2014)
188. Jungwirth T et al. *Nat. Nanotechnol.* **11** 231 (2016)
189. Yan S et al. *Nat. Nanotechnol.* **10** 40 (2014)
190. Etzkorn M et al. *Phys. Rev. B* **92** 184406 (2015)

191. Ferrón A, Lado J L, Fernández-Rossier J *Phys. Rev. B* **92** 174407 (2015)
192. Choi D J et al. *Phys. Rev. B* **94** 085406 (2016)
193. Urdaniz M C, Barral M A, Llois A M *Phys. Rev. B* **86** 245416 (2012)
194. Tao K et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 26302 (2015)
195. Urdaniz M C et al. *Phys. Rev. B* **90** 195423 (2014)
196. Udvardi L et al. *Phys. Rev. B* **68** 104436 (2003)
197. Hermenau J et al. *Nat. Commun.* **10** 2565 (2019)
198. Dzyaloshinsky I J. *Phys. Chem. Solids* **4** 241 (1958)
199. Moriya T *Phys. Rev.* **120** 91 (1960)
200. Menzel M et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 197204 (2012)
201. Schweflinghaus B et al. *Phys. Rev. B* **94** 024403 (2016)
202. Tao K, Polyakov O P, Stepanyuk V S *Phys. Rev. B* **93** 161412 (2016)
203. Ebert H, Ködderitzsch D, Minár J *Rep. Prog. Phys.* **74** 096501 (2011)
204. Lazarovits B et al. *Phys. Rev. B* **68** 024433 (2003)
205. Bruno P *Phys. Rev. B* **39** 865 (1989)
206. Mermin N D, Wagner H *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133 (1966)
207. Choi D J et al. *Rev. Mod. Phys.* **91** 041001 (2019)
208. Bose S *Phys. Rev. Lett.* **91** 207901 (2003)
209. Verma H et al. *Europhys. Lett.* **119** 30001 (2017)
210. Барабаненков Ю Н, Никитов С А, Барабаненков М Ю *УФН* **189** 85 (2019); Barabanenkov Yu N, Nikitov S A, Barabanenkov M Yu *Phys. Usp.* **62** 82 (2019)
211. Gauyacq J P, Lorente N *J. Phys. Condens. Matter* **27** 455301 (2015)
212. Bryant B et al. *Phys. Rev. Lett.* **111** 127203 (2013)
213. Cohen-Tannoudji C, Dupont-Roc J, Grynberg G *Atom-Photon Interactions: Basic Process and Applications* (New York: Wiley, 1998)
214. Шишков В Ю и др. *УФН* **189** 544 (2019); Shishkov V Yu et al. *Phys. Usp.* **62** 510 (2019)
215. Gauyacq J P, Lorente N *Surf. Sci.* **630** 325 (2014)
216. Landau L, Lifshitz E, in *Perspectives in Theoretical Physics: the Collected Papers of E.M. Lifshitz* (Ed. L P Pitaevskii) (Oxford: Pergamon Press, 1992) pp. 51–65
217. Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Статистическая физика Ч. 2 Теория конденсированного состояния* (М.: Физматлит, 2004); Пер. на англ. яз.: Lifshitz E M, Pitaevskii L P *Statistical Physics Vol. 2 Theory of the Condensed State* (Oxford: Butterworth-Heinemann, 1980)
218. Li Y, Liu B G *Phys. Rev. B* **73** 174418 (2006)
219. Glauber R J *J. Math. Phys.* **4** 294 (1963)
220. Li J, Liu B G *J. Magn. Magn. Mater.* **378** 186 (2015)
221. Smirnov A S et al. *New J. Phys.* **11** 063004 (2009)
222. Li Y, Liu B G *Phys. Rev. Lett.* **96** 217201 (2006)
223. He L, Kong D, Chen C J. *Phys. Condens. Matter* **19** 446207 (2007)
224. Tsysar K M, Kolesnikov S V, Saletsky A M *Chinese Phys. B* **24** 097302 (2015)
225. Колесников С В, Цысарь К М, Салецкий А М *ФТТ* **57** 1492 (2015); Kolesnikov S V, Tsysar K M, Saletsky A M *Phys. Solid State* **57** 1513 (2015)
226. Tsysar K M et al. *Mod. Phys. Lett. B* **31** 1750142 (2017)
227. Колесников С В *Письма в ЖЭТФ* **103** 668 (2016); Kolesnikov S V *JETP Lett.* **103** 588 (2016)
228. Колесников С В, Колесникова И Н *ЖЭТФ* **152** 759 (2017); Kolesnikov S V, Kolesnikova I N *J. Exp. Theor. Phys.* **125** 644 (2017)
229. Puchala B, Falk M L, Garikipati K J. *Chem. Phys.* **132** 134104 (2010)
230. Колесников С В и др. *Матем. моделирование* **30** (2) 48 (2018)
231. Kolesnikov S V, Kolesnikova I N *IEEE Magn. Lett.* **10** 2509105 (2019)
232. Kolesnikov S V, Kolesnikova I N *Phys. Rev. B* **100** 224424 (2019)

Formation and properties of metallic atomic chains and wires

A.G. Syromyatnikov^(1,2,a), S.V. Kolesnikov^(1,b), A.M. Saletsky⁽¹⁾, A.L. Klavsyuk^(1,c)

⁽¹⁾ Lomonosov Moscow State University, Physics Department, Leninskie gory 1, str. 2, 119991 Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, ul. Kosygina 4, 119991 Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(a) ag.syromyatnikov@physics.msu.ru, ^(b) kolesnikov@physics.msu.ru, ^(c) klavsyuk@physics.msu.ru

We discuss the current state of a promising area of modern physics, the study of the physical properties of metal nanowires and atomic chains. One-dimensional nanostructures are attractive because of both the promise of their practical applications and the possibility of using them to test various theoretical models and approaches by comparing theoretical results with experimental data. We describe experimental conditions under which metal nanowires form on metal and semiconductor surfaces. We give special attention to theoretical models describing the scenario of nanowire growth on various surfaces. We analyze the main experimentally determined factors that affect the distribution of nanowire lengths. We show that the distribution of nanowire lengths on metal and semiconductor surfaces depends not only on external parameters but also on the formation time. We consider the magnetic properties of finite-length atomic chains located on the surfaces of metal and semiconductor crystals. We demonstrate a correlation among the structural, electronic, and magnetic properties of nanowires. We elucidate the effect that nanowires exert on the electronic properties of the surface on which they form. The nature of edge states is explained. The electron states of nanowire atoms are shown to be sensitive to the nanowire length. We discuss the Rashba effect for metal nanowires on a semiconductor surface and analyze how the exchange energy between atoms and the magnetic anisotropy energy affect the macroscopic characteristics of nanowires, such as their critical temperature and the time of spontaneous magnetization reversal.

Keywords: atomic wire, metallic chain, quantum conductivity, Rashba effect, nanomagnetism, spintronics, edge state, epitaxial growth

PACS numbers: 05.10.Ln, **61.46** – w, 68.55.A – , **68.65** – k, 73.63.Rt, **75.75** – c

Bibliography — 232 references

Received 10 May 2020, revised 11 June 2020

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **191** (7) 705–737 (2021)

Physics – Uspekhi **64** (7) (2021)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.06.038789>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.06.038789>