

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСАЖДЕНИЯ ЗОЛОТА НА ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННО-ОБУЧАЕМОГО ПОТЕНЦИАЛА

Маслов П. А.¹

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, Орехов Н. Д.¹

¹МФТИ, Физтех

maslov.pa@phystech.edu

Введение

С момента открытия графена все больший интерес вызывают двумерные материалы, одним из которых недавно стали ультратонкие золотые пленки [1]. Несмотря на возможность получения таких пленок, остается открытым вопрос о механизме их формирования. Определение этих механизмов составляет основную цель данной работы.

Задача получения и изучения роста тонких слоев металлов давно существует в различных технологиях [2, 3]. Для большинства систем было показано, что соответствующие механизмы роста приводят к формированию грубой поверхности пленки, что ухудшает ее свойства. В подобных исследованиях обычно применялись кинетические методы Монте-Карло, опирающиеся на экспериментальные данные, или межатомные потенциалы типа EAM, не всегда корректно описывающие взаимодействие [4].

Основная часть

В данной работе результаты опираются на использование методов *ab initio*. С помощью предварительного обучения на конфигурациях, обработанных пакетом VASP [5], а также методов активного обучения был получен машинно-обучаемый МТР-потенциал [6], позволяющий вести расчеты молекулярной динамики с высокой точностью на больших временных масштабах по сравнению с квантово-химическими расчётами.

Моделирование проводилось с использованием пакета LAMMPS [7]. Для эффективного моделирования релаксации материала и диффузии атомов на макроскопических временных масштабах мы чередовали молекулярно-динамические (MD) расчёты с методами Монте-Карло (MC).

Выводы

На основе разработанного МТР-потенциала определяется характер роста золотой пленки на поверхности меди. Метод NEB (nudged elastic band) использовался для описания перескока адатома золота по поверхности Cu(100). Сравнение между МТР и классическим потенциалом EAM показывает, что EAM завышает высоту барьера примерно на 15 %, тогда как МТР воспроизводит эталонный DFT+NEB результат с точностью лучше 1 %.

Молекулярно-динамическое моделирование осаждения золота на медные подложки показывает, что доминирующим режимом роста является послойный рост с образованием гладкой пленки. Для прояснения механизмов диффузии были выполнены MD-расчёты для одиночного адатома Au на поверхностях Cu(100), Cu(111), а также на уже осаждённой золотой плёнке. Эти расчёты показывают высокие диффузионные барьеры на Cu(100) и низкие барьеры на Cu(111), при этом на поверхности Au диффузия также остаётся быстрой. В результате образование кластеров происходит быстрее всего на Cu(111), несколько медленнее на Au и медленнее всего на Cu(100).

Литература

1. Mironov M. S. [et al.] Graphene-Inspired Wafer-Scale Ultrathin Gold Films // Nano Lett. 2024. V. 24(51). P. 16270-16275.
2. Fischer B. Nucleation and Growth in Metal-on-Metal Epitaxy: The Influence of Strain and Surface Reconstruction: Doctoral dissertation. École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1998.
3. Herman M. A., Richter W., Sitter H. Epitaxy: Physical Principles and Technical Implementation. Berlin: Springer, 2004.
4. Müser M. H., Sukhomlinov S. V., Pastewka L. Interatomic potentials: Achievements and challenges // Adv. Phys. X. 2023. V. 8(1). P. 025002.
5. Kresse G., et. al., Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, 54 (1996) 11169–11186
6. Novikov I. S. [et al.] The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2021. V. 2(2). P. 025002.
7. Plimpton S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, 117 (1995) 1–19