

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

**Исследование взаимодействия атомов
3d-металлов на вицинальной
поверхности меди**

Дипломная работа
студента 4 курса
Алексея Геральдовича
СЫРОМЯТНИКОВА

Допущен к защите:
«___» _____ 2015 года

Заведующий кафедрой:
д.ф.-м.н.
Александр Михайлович
САЛЕЦКИЙ

Научный руководитель:
к.ф.-м.н.
Андрей Леонидович
КЛАВСЮК

Оглавление

Введение	1
1 Наноструктуры 3d-металлов на вицинальной поверхности Cu (обзор литературы)	4
1.1 Эпитаксиальный рост нанопроводов кобальта на вицинальной поверхности меди	4
1.2 Теоретические исследования формирования нанопроводов кобальта и железа на поверхности меди	8
1.3 Взаимодействие 3d-металлов на вицинальной поверхности меди	11
2 Численный метод	14
2.1 Современные теоретические методы для расчета атомных структур	14
2.2 Алгоритм Верле для NVE ансамбля	15
2.2.1 Построение алгоритма Верле	16
2.2.2 Вычислительная сложность	19
2.2.3 Порядок аппроксимации	19
2.2.4 Устойчивость схемы Верле	19
2.3 Модификация схемы под модельную задачу димеризации кобальтовой проволоки	20
3 Результаты и обсуждение	22
4 Выводы	32
Список литературы	33
Список публикаций	37

Введение

В канун 1960 года на рождественском ужине, устроенном Американским физическим сообществом, знаменитый физик Ричард Фейнман прочитал свою лекцию “Внизу еще полным-полно места: приглашение в новый мир” [1]. Озвученные им идеи звучали настолько неожиданно и парадоксально, что кто-то даже задал вопрос: “Вы, конечно, шутите, мистер Фейнман?”. Однако сейчас, 55 лет спустя, очевидно, что эта лекция была случаем практически безошибочного прогноза, продуктом безупречного фейнмановского научного чутья, определившего дальнейшее развитие нанотехнологии.

Среди прочего, он упомянул возможность многократного уменьшения объема, требуемого для хранения информации, путем сжатия самих носителей. По его оценкам, «поскольку для записи одного бита информации нам необходимо примерно 100 атомов, вся заботливо собранная человечеством книжная информация может быть “записана” по указанной системе в кубике металла с размером грани около 1/200 дюйма, представляющем собой крошечную, едва различимую человеческим глазом пылинку!»

Ричард Фейнман призывал совершенствовать электронные микроскопы: «Увеличьте их разрешение в сто раз, и многие задачи сразу станут простыми и легкими.»

Однако самым важным стало предсказание появления сканирующих туннельных микроскопов (СТМ). «Речь идет о возможности располагать в требуемом порядке атомы – именно атомы, самые мелкие строительные детали нашего мира! Что произойдет, когда мы научимся реально выстраивать или укладывать атомы поштучно в заданной последовательности?» Фейнман анализирует проблемы химической чистоты веществ и, наоборот, возможность исследования и использования вещества с некоторой искусственной структурой. Описывая идею микропроцессора, Фейнман заглядывает в будущее настолько глубоко, что начинает анализировать возможные проблемы их реализации. Наконец, он описывает “ручной” химический синтез: «Химики будут заказывать синтез, а физики – просто “укладывать” атомы в нужном порядке.»

В 1961 появляются первые доступные на рынке интегральные микросхемы, производимые Fairchild Semiconductor Corporation. В 1968 году образуется компания Intel, один из

современных лидеров по производству электроники, в том числе микропроцессоров. За 44 года, с 1971 (первый коммерческий однокристалльный микропроцессор) по 2015 (процессоры Intel микроархитектуры Broadwell) технологический процесс уменьшился с 10 мкм до 14 нм[2, 3], а количество транзисторов на единице площади экспоненциально росло. Впоследствии эта зависимость получила название закона Мура – количество транзисторов, размещаемых на кристалле интегральной схемы, удваивается каждые 24 месяца. В этом году закону Мура исполняется 50 лет.

Схожим образом идет развитие магнитных носителей данных. Цифровые запоминающие устройства на магнитной основе прошли путь от 2 кбит/дюйм² у первых жестких магнитных дисков (1957 год) [4] до 1 Тбит на квадратный дюйм для современных лабораторных образцов [5, 6]; твердотельные накопители имеют сравнимую плотность записи информации[7]. Существуют также некоторые другие экзотические виды носителей информации, например, голографические носители информации, но они существуют пока исключительно в виде лабораторных образцов [8] и их исследование продолжается.

Таким образом, в настоящее время существует потребность в постоянной миниатюризации носителей информации. Плотность размещения информации можно увеличить, используя в качестве носителей магнитные атомные провода, расположенные на vicinalных металлических поверхностях. Главным преимуществом использования ступенчатых поверхностей в качестве подложек является тот факт, что на них одномерные упорядоченные структуры формируются вследствие самоорганизации при эпитаксиальном росте. Такой подход является более экономным, чем метод литографии. Кроме того, спинвентильные Co нанопровода интересны для фундаментальных исследований, поскольку обладают уникальными электронными и магнитными свойствами [9–13].

При изучении свойств нанопроводов одним из главных направлений является вопрос исследования взаимодействия адатомов между собой и с подложкой, поскольку взаимодействие между адатомами играет важную роль во всех явлениях на поверхности. Оно оказывает существенное влияние практически на все свойства наноструктур – их структуру, термическую устойчивость, миграцию адатомов по поверхности, реакции на поверхности.

Настоящая работа посвящена исследованию взаимодействия адатомов 3d-металлов, в частности, кобальта, на вицинальной поверхности меди. Кроме того, исследовано их взаимодействие со ступенью подложки.

Глава 1

Наноструктуры 3d-металлов на вицинальной поверхности Cu (обзор литературы)

1.1 Эпитаксиальный рост нанопроводов кобальта на вицинальной поверхности меди

Эпитаксиальный рост тонких металлических пленок на поверхности металлов представляет интерес для исследовательских групп уже более полувека – рост кобальта на меди впервые описан в 1936 году [14]. С тех пор исследования системы Co/Cu(111) интенсивно проводились и проводятся различными научными группами [9–12, 15–20].

В большинстве работ осаждение кобальта на медь происходило при комнатной температуре. При низком значении покрытия $D \sim 0.1$ монослоя (МС), на поверхности Cu(111) наблюдаются два основных явления: во-первых, границы террас декорируются островками кобальта как с верхней, так и с нижней стороны ступени, в результате край террасы становится неправильной, “рваной” формы. Во-вторых, практически непрерывно, однако нерегулярно, вдоль края ступени формируется структура, состоящая из перемешанных атомов меди и кобальта [12]; и ее ширина составляет $\sim 50 \text{ \AA}$. Стоит отметить, структура формируется внизу ступени; имея высоту, вдвое большую высоты ступени подложки, она выступает из террасы [10]. При повышении покрытия адатомы на поверхности террасы начинают образовывать острова, которые имеют высоту в два атома. Однослойные острова обнаружены не были [15]. Когда самые маленькие острова имеют неправильную форму [16], бóльшие (размером около 40 \AA) имеют ярко выраженную треугольную форму; причем на одной поверхности сосуществуют острова, повернутые друг относительно

друга на 180 градусов, что видно на рис. (1.1) [9]. Отмечается, что островов, повернутых в одну сторону в два раза больше, чем повернутых в другую. Подобные острова начинают формироваться при увеличении значения покрытия до $D \sim 0.6$ МС и более.

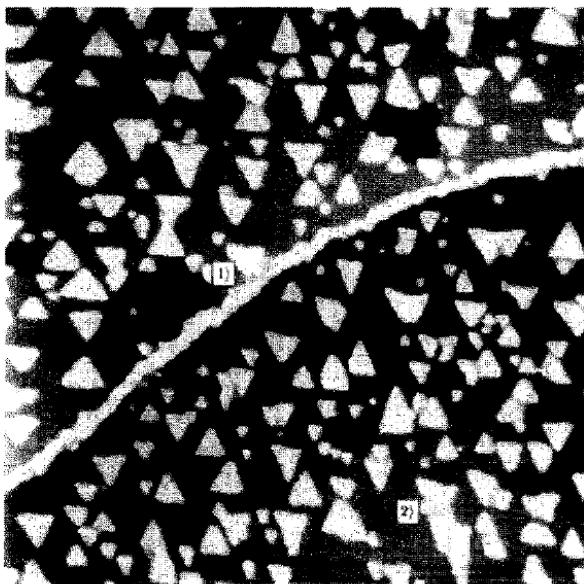


Рис. 1.1. Изображение двухслойных островов кобальта, сформировавшихся на террасе при $D = 0.6$ МС [9]

При покрытии $D \sim 1.3$ МС рост структур кобальта на медной подложке происходит главным образом у ступеней. Провода, образованные таким путем, не распределены равномерно, в силу неоднородного распределения самих ступеней на поверхности [10].

Стоит отметить, что при значении $D \sim 1.54$ МС на террасах формируются отдельные острова больших размеров. Острова у края террасы, растут и увеличиваются в сторону террасы [12].

Далее, при значениях покрытия $D \leq 2$ МС двухслойные острова кобальта продолжают расти и они не коалесцируют – подложка еще видима. При покрытии D , равном 2 МС, сверху двухслойных кристаллитов нарастает третий слой, высотой в один атом. Преимущественно он вырастает на островах, декорирующих край террасы, что делает его положение все еще различимым. С другой стороны, третий слой, образующийся на двухслойных островах более не демонстрирует треугольной формы; он показывает тенденцию

к росту в форме шестиугольников, покрывающих некоторую часть двухслойных кристаллитов, которые, предположительно, срослись [9].

При значениях покрытия $D \sim 5$ МС морфология роста островов сохраняется: наблюдаются многослойные острова; пленка состоит из плоских кристаллитов, чей размер практически не отличается от размера островов при значении $D \sim 0.6$ МС. Рост островов не происходит слой за слоем; фактически, первый слой не покрывает всю поверхность. Острова растут в высоту и формируют сначала двухслойные, а потом и многослойные острова, т.е. хотя эпитаксиальная пленка и образуется, она не ровная и однородная, а градуированная, зернистая [17].

Отдельно стоит рассмотреть исследование низкотемпературного осаждения атомов кобальта на поверхность Cu(111), которое было представлено в работе [11]. Рост структур происходил при температуре 150 К, с величиной потока адатомов $F = 0.0012$ МС/с; в результате на поверхности образовывались случайно ветвистые острова со средней шириной ветви около 30 Å и высотой 3.8 ± 0.2 Å, что интерпретировалось как двухслойный остров в центре, окруженный однослойным полем. Одновременно были проведены эксперименты по осаждению адатомов кобальта при температурах 170, 225 и 300 К; при увеличении температуры осаждения дендритная форма островов утрачивалась, уступая место треугольной. После осаждения при температуре 170 К и дальнейшем быстром нагреве до комнатной температуры, однослойное поле, окружающее центральный остров, уменьшалось, оставляя в результате только двухслойную центральную часть.

В итоге, результаты рассмотренных выше экспериментальных работ показывают, что атомные провода из кобальта на поверхности Cu(111) при комнатной температуре не формируются. Подобное поведение характерно и для системы Fe/Cu(111). [18]

Иная морфология роста структур адатомов кобальта возникает при напылении при температуре ~ 150 К без последующего нагрева до комнатной температуры [19]. Чистая поверхность меди демонстрирует нестабильность краев террас, в результате чего на изображении, полученном с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) вдоль

них получается дрожание, что видно на рисунке 1.2(a). При напылении кобальта с потоком $F = 0.01$ МС/мин при значении покрытия $D \sim 0.09$ МС на поверхности образуются атомные провода с ровными краями ступени (рис. 1.2(b)). Такие ровные края, в сравнении с дрожанием чистого края, образуются из-за того, что проволоки имеют свойство закреплять атомы поверхности на своем месте на краю ступени. При немного большем значении покрытия $D \sim 0.12$ МС наблюдаются атомные провода двухатомной ширины; они имеют ширину ~ 5.4 Å (рис. 1.2(c)). В дополнение к проводам, на террасах наблюдаются впадины (рис. 1.2(d)). Согласно нескольким наблюдениям, эти низины относятся к атомам Со, локально погруженным в террасу.

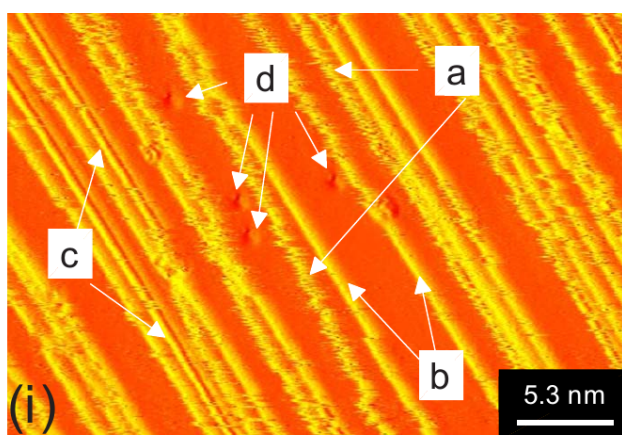


Рис. 1.2. Различные фазы роста кобальтовых структур с увеличением значения покрытия D . На изображении, снятом при $D \sim 0.12$ МС: (a) дрожание чистого края ступени, проволоки шириной в один (b) и в два (c) атома, а также погруженные в террасу атомы Со (d) [19]

В более поздней работе, опубликованной Заки и др. [20] в 2013 году, посвященной экспериментальному наблюдению за димеризацией атомной одномерной системы, использовался СТМ при низкой температуре для изучения поведения атомов кобальта на поверхности меди. При 5 К эти цепочки не являются равномерными, а состоят из димеров, расстояние между которыми, 5.1 Å, что равно двойному расстоянию между ближайшими соседями на поверхности Cu(111), 2×2.556 Å. (см. рисунок 1.3)

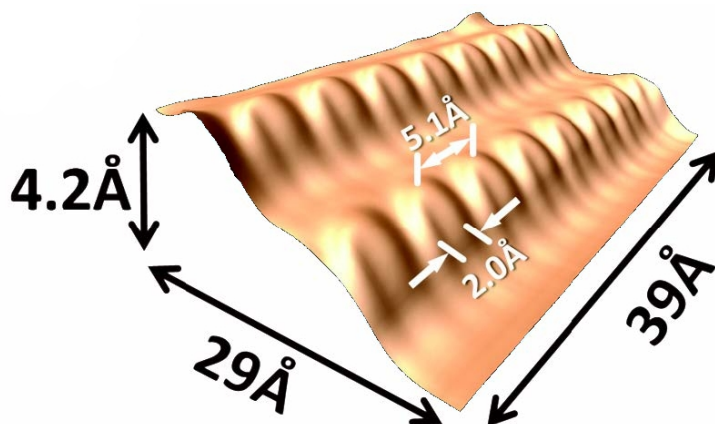


Рис. 1.3. СТМ-изображение димеризованной цепочки кобальта на вицинальной поверхности меди[20]

1.2 Теоретические исследования формирования нанопроводов кобальта и железа на поверхности меди

В 2005 году Мо и др. [21] провели теоретическое исследование систем Fe/Cu(111) и Co/Cu(111) с помощью расчетов, основанных на теории функционала электронной плотности.

Согласно их работе, атом железа предпочитает занимать ГЦК узел на ступенчатой поверхности независимо от своего расположения на ней, в середине террасы либо на ее краю рядом со ступенью. Для террасы диффузионный барьер для прыжка составляет ~ 0.025 eV, поэтому если терраса небольшая адатом довольно быстро оказывается возле ступени. На краю ступени, при движении с верхней ее части, механизм движения адатома гораздо сложнее. Адатом железа, вместо того, чтобы перескочить на нижнюю террасу с энергетическим барьером 1 eV (рис. 1.4, $A_1 \rightarrow B_1$), погружается в ступень, через обмен с атомом меди (рис. 1.4, $A_1 \rightarrow D_1$), где энергетический барьер всего лишь ~ 0.07 eV. Далее вытесненный атом меди предпочитает остаться внизу ступени, соседним по отношению к адатому железу.

Рассмотрим аналогичную ситуацию снизу ступени. В этом случае адатом железа сначала должен будет выдвинуть атом меди из ступени (рис. 1.4, $B_1 \rightarrow C_1$), преодолев при этом

барьер высотой 0.66 eV ; потом атом меди прыгнет на террасу вниз, для этого процесса энергетический барьер составит 0.34 eV (рис. 1.4, $C_1 \rightarrow D_1$). Таким образом, независимо от того, откуда, сверху или снизу, к краю ступени придет адатом железа, конечная конфигурация для обоих случаев будет одна и та же.

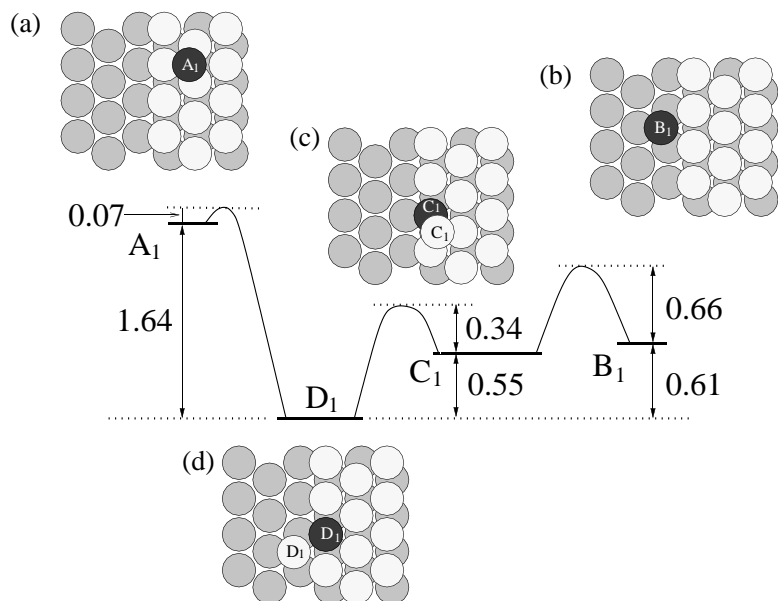


Рис. 1.4. Формирование железной проволоки на краю медной ступени (первая фаза): вид сверху. Белые и серые атомы отображают атомы меди на верхнем и следующем слое соответственно; черные – атомы железа. Относительные энергии и энергии активации для переходов между состояниями указаны рядом с вертикальными стрелками, их соединяющими [21]

При приближении второго адатома железа к краю террасы, уже содержащему погруженный атом железа, он, скорее всего, продолжит формирование погруженной структуры длиной в два атома. Следующие адатомы железа будут так же погружаться рядом, что приведет к появлению погруженного ряда атомов железа на краю ступени медной поверхности.

В случае приближения адатома железа к границе ступени, уже содержащей железную проволоку, стабильной конфигурацией является второй ряд атомов железа прямо сверху над первым; следовательно дополнительное расположение адатомов железа на вицинальной поверхности меди приведет к появлению железной проволоки с видимой шириной в один атом. Дальнейший рост приведет к росту ширины проволоки, однако самая узкая

стабильная железная проволока имеет в ширину один атом и располагается на верхнем краю ступени.

Так как железо и кобальт очень похоже взаимодействуют с медной поверхностью, то предполагается, что процессы обмена для кобальта будут, происходит аналогичным образом, изображенным на рисунке 1.4. В направлении $\langle 011 \rangle$ поверхности Cu(111) расстояние между ближайшими соседями Cu-Cu равно $d_{Cu-Cu} = 2.56 \text{ \AA}$, тогда как для объемцентрированной решетки железа оно меньше и равно $d_{Fe-Fe} = 2.48 \text{ \AA}$ в направлении $\langle 111 \rangle$. Для кобальта расстояние между ближайшими соседями на поверхности (0001) $d_{Co-Co} = 2.51 \text{ \AA}$, что позволяет погруженной проволоке кобальта встраиваться в поверхность гранецентрированной решетки медной подложки даже лучше, чем железной. Действительно, первая фаза (образование атомной проволоки) проходит таким же образом, но во второй фазе проявляются различия: кристалл кобальта имеет гексагональную структуру, и его поверхность (0001) имеет такой же вид, что и поверхность меди (111), а также расстояние между ближайшими соседями у них примерно равное. Такое сходство позволяет погруженному кобальтовому проводу быть размещенным в узлах поверхности. Далее, атомы кобальта должны быть погружены в поверхность, удваивая таким образом ширину погруженного провода кобальта.

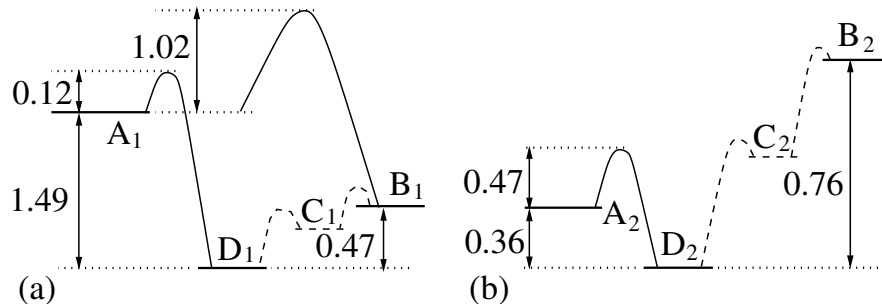


Рис. 1.5. Относительные энергии и энергетические барьеры (в эВ) для первой (а) и второй (б) фаз кинетического пути для кобальта [21]

Как показано на рисунке 1.5, при движении адатома снизу ступени (слева), конечное положение лежит энергетически ниже начального, что теоретически делает его достижимым путем обмена с атомами ступени. Детальное изучение этого момента показало, что дополнительный ряд кобальта связывается ступенью. В случае, если дополнительные ато-

мы кобальта движутся к краю террасы сверху, то они продолжают погружаться в ступень путем обмена позициями.

Полученный в работе [21] результат находится в противоречии с экспериментальной работой Заки [20], в которой атомные провода образуются внизу ступени.

Важно также рассмотреть теоретическую работу, выполненную Дингом и другими [22]. Согласно их расчетам, вероятность подхода адатома кобальта к ступени сверху менее вероятна, так как потенциальный барьер в этом направлении более чем в 6 раз выше: 172 eV сверху против 26 eV снизу. Здесь видно серьезное противоречие между этими двумя работами.

Вышеперечисленные работы показывают, что адатомы Co в процессе роста формируют структуры на краях ступеней Cu(111). Тем не менее, некоторые важные вопросы остаются без ответа: во-первых, могут ли одинаковые атомные провода Co формироваться на прямых границах ступени; будут ли такие провода кобальта погружены в ступень; и наконец, будут ли существовать при комнатной температуре другие, более сложные, атомные структуры, если террасы станут приближаться к атомным размерам.

1.3 Взаимодействие 3d-металлов на вицинальной поверхности меди

При адсорбции чужеродных атомов или молекул на поверхность твердого тела основное изменение большинства свойств поверхности происходит при заполнении тончайшего (толщиной в один атом или молекулу) слоя. Это обстоятельство предопределяет повышенный интерес к изучению свойств субмонослойных (более разреженных, чем монослой) покрытий [23].

Во всех явлениях на поверхности важную роль играет взаимодействие между адсорбированными частицами. Оно оказывает существенное влияние практически на все свойства адсорбированного слоя — его структуру, термическую устойчивость, спектры колеба-

ний адатомов, миграцию частиц по поверхности, реакции на поверхности и т. д. Это взаимодействие также влияет на закономерности изменения различных свойств поверхности (работы выхода, каталитической активности и т. д.) под воздействием адсорбированного слоя.

Различные механизмы взаимодействия адатомов удобно рассматривать, классифицируя их по природе виртуальных квазичастиц, которыми обмениваются адсорбированные атомы. Так, взаимодействие, обусловленное непосредственным обменом электронами между адатомами, согласно сложившейся в теории хемосорбции терминологии, называется прямым, а взаимодействие, обусловленное обменом электронами через зону проводимости подложки, – непрямым. Электростатическое взаимодействие между заряженными адатомами возникает из за обмена фотонами и поверхностными плазмонами, упругое – из за обмена фононами и т. д. Очевидно, однако, что такое деление механизмов строго лишь постольку, поскольку строго рассмотрение подложки как системы, состоящей из невзаимодействующих квазичастиц. Отметим также условность принятой терминологии, так как, строго говоря, любое взаимодействие адатомов является непрямым, поскольку в нем принимает участие подложка.

Естественно, что ранее аналогичные механизмы рассматривались при изучении взаимодействия примесей в объеме твердого тела. Рудерман и Киттель [24] впервые показали, что во взаимодействии примесей в металле важную роль играет «непрямая обменная связь» через электроны проводимости металла, энергия которой зависит от расстояния между примесями по закону

$$E(R) \sim R^{-3} \cos(2k_F R). \quad (1.1)$$

Дальнодействующий осциллирующий характер этого взаимодействия обусловлен резким обрывом при энергии Ферми $\varepsilon = \varepsilon_F$ распределения электронов проводимости в металле, так что интерференция рассеянных на примеси электронных волн с фермиевским импульсом $k = k_F$ приводит к хорошо известным фриделевским осцилляциям плотности электронов [25, 26]. Очевидно, что фриделевские осцилляции должны существенно зависеть от формы поверхности Ферми (ПФ) металла. Действительно, было показано [27], что если на

ПФ имеются цилиндрические участки, то в направлении, перпендикулярном оси цилиндра,

$$E(R) \sim R^{-2} \sin(2k_F R), \quad (1.2)$$

а при наличии плоских участков на ПФ в перпендикулярном им направлении [28]

$$E(R) \sim R^{-1} \cos(2k_F R). \quad (1.3)$$

Аналогичные фриделевские осцилляции имеются и при взаимодействии между адсорбированными атомами на поверхности металла, причем в силу ряда причин здесь они проявляются более ярко.

Глава 2

Численный метод

2.1 Современные теоретические методы для расчета атомных структур

Для определения атомной структуры на поверхности металлов существует много различных методов. Сюда относятся, в порядке уменьшения точности: “первопринципные” методы, не использующие и использующие приближения, метод молекулярной динамики (МД), использующие полуэмпирические потенциалы, метод Монте-Карло.

- ***Ab initio* методы**

Первопринципные методы обеспечивают максимальную точность из всех перечисленных, не используя никаких приближений. Однако стоит принять во внимание вычислительную стоимость первопринципных методов: в сравнении с менее точными подходами, вроде молекулярной динамики, *ab initio* методы часто требуют гораздо большие объемы времени, памяти и дискового пространства для достижения результата.

- **Методы Монте-Карло**

Стохастические методы часто используются для симуляции систем с большим количеством степеней свободы, таких, как жидкости, неупорядоченные материалы, твердые тела, клеточные структуры.

Метод Монте-Карло дает решение задачи в виде параметра гипотетической популяции. Статистические оценки параметра могут быть получены из анализа выборки, сгенерированной с помощью последовательности случайных чисел [29].

- **Молекулярная динамика**

Исходной посылкой метода МД является хорошо определенное микроскопическое описание физической системы. Метод вычисляет характеристики системы, используя уравнения движения, причем позволяет получать как статические, так и динамические характеристики.

Основные положения молекулярной динамики [29]:

- Движение атомов описывается классической механикой. Закон движения находится просто аналитически.
- Межатомные силы находятся как градиент потенциальной энергии межатомного взаимодействия, то есть просто как классические потенциальные силы.
- Для получения результатов термодинамического характера не требуется знать точно все траектории частиц.

Молекулярная динамика применима для систем с характерными размерами от единиц до сотен ангстрем, и позволяет исследовать эволюцию системы на временных интервалах от наносекунд до микросекунд [30].

Для определения координат атомов рассматриваемой системы нужно решить систему уравнений движения - дифференциальных уравнений второго порядка

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}, \quad (2.1)$$

где \mathbf{r}_i – радиус вектор i -го атома, m_i – масса, \mathbf{F}_i – равнодействующая сила, действующая на i -й атом. Таким образом, имеется всего i уравнений движения, определяющих положение атомов и их скорости в данной системе.

2.2 Алгоритм Верле для NVE ансамбля

Для решения дифференциальных уравнений (2.1) используется метод молекулярной динамики, а именно алгоритм Верле в скоростной форме для NVE ансамбля [29]. С его помощью рассчитывается эволюция микроканонического ансамбля вдоль траектории с по-

стоянной энергией в фазовом пространстве.

Сам алгоритм состоит из четырех шагов, два из которых итерировуются до достижения требуемого результата:

1. Задать положения \mathbf{r}_1^1 на шаге 1.
2. Задать скорости \mathbf{v}_1^1 на шаге 1.
3. Вычислить положения на временном шаге $n + 1$.

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + h\mathbf{v}_i^n + \frac{h^2}{2m}\mathbf{F}_i^n$$

4. Вычислить скорости на временном шаге $n + 1$.

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^n + \frac{h}{2m}(\mathbf{F}_i^n + \mathbf{F}_i^{n+1})$$

Запишем выражение для сил (i – не индекс атома, а компонента вектора силы: $i = \{x, y, z\}$):

$$F_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = -\frac{\partial V_i(\mathbf{r}_i, t)}{\partial \mathbf{r}_i} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{dU_{ij}(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} \quad (2.2)$$

Достоинством выбранного алгоритма является, прежде всего, его самостартуемость – скорости и положения частиц вычисляются на одном временном шаге – то есть для запуска вычислений требуется всего лишь начальное состояние микроканонического ансамбля.

При использовании данного алгоритма энергия системы и силы, действующие на атомы, вычислялись с помощью потенциалов Россато-Жиллоп-Легранда, описанных выше.

2.2.1 Построение алгоритма Верле

Рассмотрим построение алгоритма Верле, для простоты, в одномерном виде [31].

$$\frac{dx}{dt} = v(t), \text{ и } \frac{dv}{dt} = a(t), \quad (2.3)$$

где $a(t) = a(x(t), v(t), t)$. Возьмем равномерную сетку. Положим временной интервал между шагами на равномерной временной сетке h ; x_n, v_n, a_n – значения x, v, a на шаге $t_n = t_0 + n \cdot h$, таким образом, $a_n = a_n(x_n, v_n, t_n)$. Задача конечноразностных методов – определить x_{n+1}, v_{n+1} на шаге $t_{n+1} = t_n + h$. Для обеспечения консервативности системы шаг h должен быть выбран достаточно маленьким. Разложим $x_{n+1} = x(t_n + h)$ и $v_{n+1} = v(t_n + h)$ в ряд Тейлора по переменной t :

$$x_{n+1} = x_n + v_n h + \frac{1}{2} a_n h^2 + \mathcal{O}(h^3) \quad (2.4)$$

$$v_{n+1} = v_n + a_n h + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.5)$$

Аналогично (2.4),

$$x_{n-1} = x_n - v_n h + \frac{1}{2} a_n h^2 + \mathcal{O}(h^3) \quad (2.6)$$

Сложив (2.4) и (2.6), получим

$$x_{n+1} + x_{n-1} = 2x_n + a_n h^2 + \mathcal{O}(h^3) \quad (2.7)$$

или

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a_n h^2 + \mathcal{O}(h^3) \quad (2.8)$$

Похожим образом, разность (2.4) и (2.6) даст

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.9)$$

Так, общая ошибка, связанная с алгоритмом Верле – третьего порядка для координаты и второго порядка для скорости. Однако скорости не играют роли в интегрировании уравнений движения. Так как алгоритм Верле в такой форме не самостартует, первые значения должны быть получены, исходя из каких-то других соображений [29]. Дополнительная

проблема состоит в том, что скорость в уравнении (2.9) получается путем вычитания двух чисел одинаковой величины. При использовании ЭВМ, всегда оперирующих числами конечной точности, такая операция ведет к потере точности и может привести к появлению существенной погрешности округления.

Математически эквивалентная версия алгоритма Верле записывается как

$$x_{n+1} = x_n + v_n h + \frac{1}{2} a_n h^2 \quad (2.10)$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_{n+1} + a_n) h \quad (2.11)$$

Видно, что эти уравнения, известные как скоростная форма алгоритма Верле, способны стартовать самостоятельно и минимизируют ошибки округления. Возможно получить уравнения (2.10) и (2.11) из (2.4) и (2.5), следуя из следующих соображений. Решая (2.5) для x_{n-1} , запишем $x_{n-1} = x_{n+1} - 2v_n h$. Подставляя это выражение для x_{n-1} в (2.4) и решая его для x_{n+1} , найдем (2.10). Затем воспользуемся (2.5), чтобы записать v_{n+1} как

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+2} - x_n}{2h}, \quad (2.12)$$

и, используя (2.4), получим $x_{n+2} = 2x_{n+1} - x_n + a_{n+1} h^2$. Подставляя формулу для x_{n+2} в (2.12), получим

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+1} - x_n}{h} + \frac{1}{2} a_{n+1} h. \quad (2.13)$$

Наконец, мы используем (2.10) для x_{n+1} чтобы избавиться от $x_{n+1} - x_n$ в (2.13); далее после несложных преобразований получим (2.11).

Можно показать, что полученная схема обобщается на многомерную задачу путем замены $r \rightarrow \mathbf{r}$, $v \rightarrow \mathbf{v}$ и $a \rightarrow \mathbf{a}$.

2.2.2 Вычислительная сложность

Основное время при расчетах занимает вычисление сил, с которыми частицы и подложка действуют на другие частицы. Оптимальное, с учетом третьего закона Ньютона, количество таких вычислений равно

$$N_{TC} = \frac{(N-1)N}{2} + N = \frac{(N+1)N}{2} = \mathcal{O}(N^2) \quad (2.14)$$

2.2.3 Порядок аппроксимации

Если силы являются дважды непрерывно дифференцируемыми функциями в достаточно малой окрестности точного решения, то нетрудно при помощи разложений по формуле Тейлора строго выяснить, что разностные уравнения в системе (12) аппроксимируют дифференциальные уравнения (3) со вторым порядком по временному шагу h . Качественно это видно из того, что в формуле для \mathbf{r}_i^{n+1} задействована вторая производная от радиус-вектора; в формуле для \mathbf{v}_i^{n+1} в левой части стоит центрально-разностная производная в точке $t_{n+\frac{1}{2}}$, а правая часть аппроксимирует $\mathbf{a}_i^{n+\frac{1}{2}}$ со вторым порядком (среднее арифметическое). Н.у. аппроксимированы с бесконечным порядком, т.е. абсолютно точно.

2.2.4 Устойчивость схемы Верле

Что касается устойчивости схемы и тем более сходимости к точному решению, то этот вопрос до сих пор является открытым [32].

Однако после анализа проведенных ранее компьютерных экспериментов, отраженных в [29, 33–35], был выбран временной шаг $h = 2.5 \cdot 10^{-14}$ секунды, в предположении, что в течение временного интервала порядка $10^{-11} \div 10^{-9}$ секунды схема будет вести себя устойчиво.

Схема Верле обладает многими преимуществами: она алгоритмически проста, не требует избыточно большого количества памяти и подсчетов сил, в отличие от алгоритмов Нордсика-Гира или схем Рунге-Кутты высокого порядка, имеет второй порядок аппроксимации и, наконец, не противоречит двум основным теоремам динамики об изменении количества и момента количества движения. Тем не менее она имеет и недостатки: напри-

мер, вычислительную сложность на каждом шаге порядка $\mathcal{O}(N^2)$.

2.3 Модификация схемы под модельную задачу димеризации кобальтовой проволоки

Стремясь рассмотреть взаимодействие адатомов кобальта на вицинальной поверхности меди, первоначально в наиболее простом виде, модельная задача была построена для одномерной системы адатомов кобальта, находящихся в некотором гармоническом потенциале.

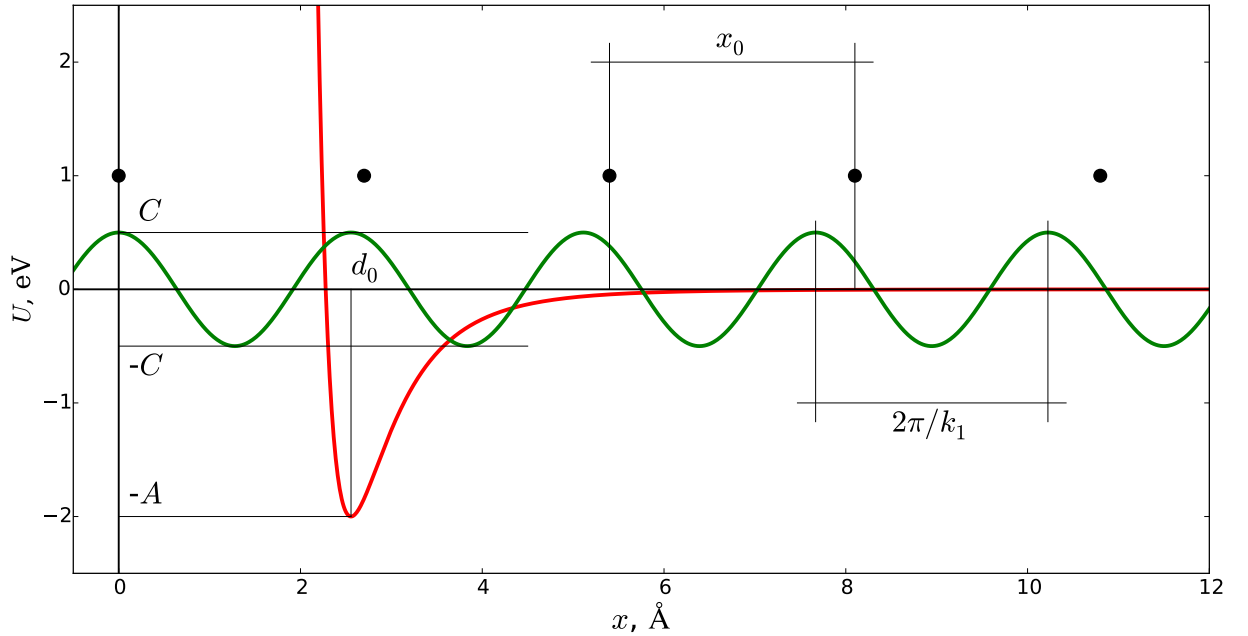


Рис. 2.1. Качественный вид потенциала межатомного взаимодействия и гармонического взаимодействия. Обозначены параметры потенциалов, изменяемые либо рассчитанные для этой задачи

В вычислительных экспериментах используется центрально-симметричный модифицированный потенциал Леннарда-Джонса для взаимодействия атомов между собой:

$$U_{ij}(r) \equiv U_{ij}^{LJ}(r) = A \left(\left(\frac{d_0}{r - \Delta} \right)^{12} - 2 \left(\frac{d_0}{r - \Delta} \right)^6 \right) \quad (2.15)$$

и гармонический потенциал – для взаимодействия их с подложкой:

$$V_i(r_i) = C \cos(k \cdot \mathbf{r}_i) \quad (2.16)$$

В данной задаче в качестве межатомных потенциалов (ур-я (2.15), (2.16)) используются модифицированный потенциал Леннарда-Джонса и гармонический потенциал, имитирующий поверхность меди. Соответственно, силы, вычисляемые как градиент потенциальной энергии (ур. (2.2)), записываются в следующем виде:

$$-\frac{dU_{ij}(r)}{dr} = A \frac{12}{d_0} \left(\left(\frac{d_0}{r - \Delta} \right)^{13} - \left(\frac{d_0}{r - \Delta} \right)^7 \right) \quad (2.17)$$

$$-\frac{dV_i(r_i)}{dr_i} = C k_1 \sin(k_1 \cdot r_i) \quad (2.18)$$

Глава 3

Результаты и обсуждение

Прежде чем перейти к обсуждению расчетов, связанных с расчетом энергии взаимодействия адатомов Co на вицинальной поверхности Cu(111), рассмотрим модельную задачу, в которой взаимодействие адатома со ступенью представимо как суперпозиция нескольких видов взаимодействий. Первое из них – прямое взаимодействие, которое играет значительную роль на близких расстояниях и описывает притяжение адатомов в системе. Расчет энергии на расстоянии ближайших соседей был произведен с помощью полуэмпирических потенциалов, используемых в работе [36].

Расположение адатома на поверхности приводит к несимметричному перераспределению экранирующего заряда, так что адатом вместе с экранирующим его электронным облаком образуют диполь. На ступени также происходит перераспределение экранирующего заряда атомов ступени [37], поэтому ступень можно рассматривать как систему диполей. Энергия диполь–дипольного взаимодействия адатомов на поверхности была представлена как сумма энергий взаимодействия точечных зарядов, с зарядом $\pm 0.39e$.

Наши расчеты показывают, что адатом на расстоянии третьих соседей от ступени испытывает отталкивание. Максимальное значение энергии взаимодействия на нижней части ступени равно 68 meV, а на верхней части ступени – 120 meV. Вторым минимумом значения энергии взаимодействия на верхней террасе (-9 meV), что также меньше, чем минимум на нижней террасе (-6 meV). Из сравнения результатов первопринципных расчетов с результатами модельной задачи следует, что результаты количественно различаются. Однако модель, в которой используется принцип суперпозиции, способна качественно описать взаимодействие адатома Co со ступенью [38].

Последний тип взаимодействия связан с взаимодействием адатомов ступени с адатомом через электронный газ, который формируется на поверхности металлов. Такое взаимодействие носит дальнедействующий осциллирующий характер и обусловлено резким обрывом при энергии Ферми распределения электронов проводимости в металле, так что интерференция рассеянных на ступени электронных волн с фермиевским импульсом приводит к хорошо известным Фриделевским осцилляциям плотности электронов и определяется выражением [23]:

$$E_{Fr}(r) = \sum_i \frac{A_{Fr} \cos(2k_F r_i + \delta)}{r_i^2}. \quad (3.1)$$

Энергия взаимодействия Co со ступенью на поверхности Cu(111) для модельной задачи со следующими параметрами: $A_{Fr} = 115 \text{ meV} \cdot \text{\AA}^2$, $k_F = 0.21 \text{ \AA}^{-1}$, $\delta = 2.9$ рад. для нижней террасы, $\delta = 4.5$ рад. для верхней террасы, показана на рис. 3.1. Именно диполь-дипольное взаимодействие и фриделевское электростатическое взаимодействие объясняют отталкивающий барьер ступени.

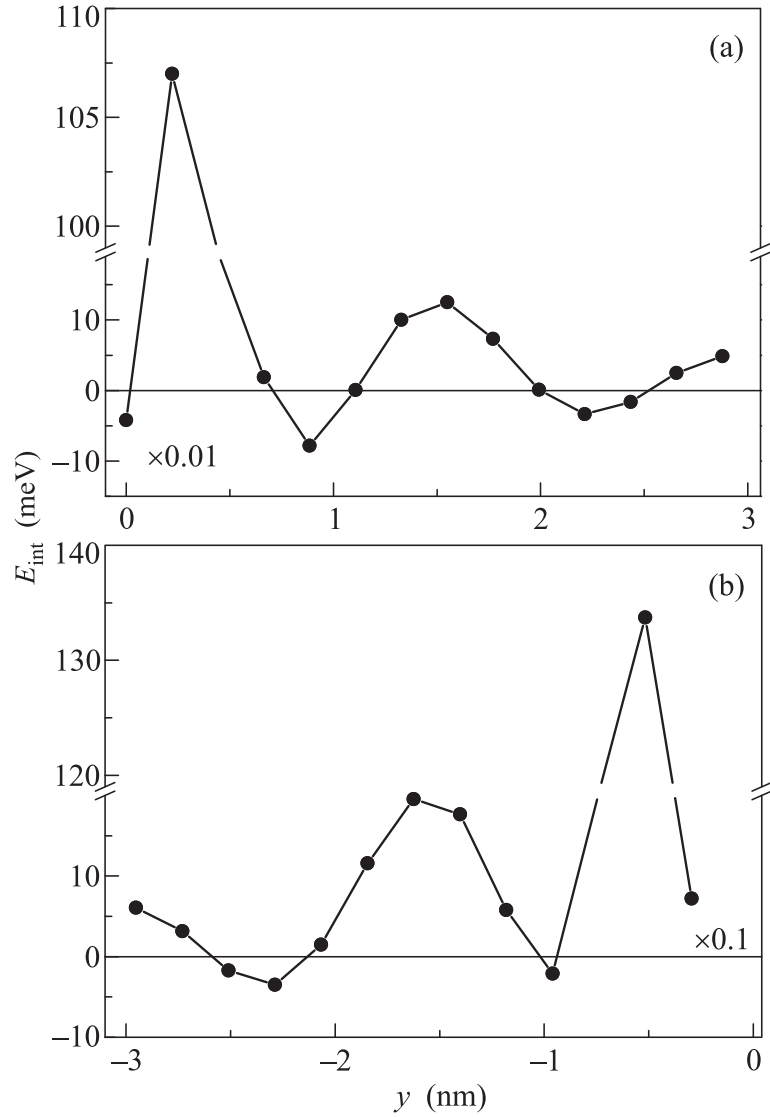


Рис. 3.1. Энергия взаимодействия Co с бесконечной ступенью поверхности Cu(111) на нижней террасе (a) и на верхней террасе (b), рассчитанная при помощи предложенной модели [38]

Различие в отталкивающих барьерах для адатома Co со ступенью может приводить к тому, что при низких температурах адатомы Co будут приближаться к ступени с нижней части ступени и, как следствие, формировать там структуры. Для подтверждения этого утверждения оценим относительные частоты двух событий для двух различных температур поверхности (100 K и 300 K) с помощью формулы

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT}\right), \quad (3.2)$$

где E_1 , E_2 – отталкивающие барьеры на верхней и нижней террасе соответственно, k –

постоянная Больцмана, T – температура поверхности. Учитывая отталкивающий барьер как разность между максимумом и минимумом, получаем $E_2 - E_1 = -55 \text{ meV}$, а для относительных частот получаем $\frac{\nu_1}{\nu_2} = 0.002$ при 100 К и $\frac{\nu_1}{\nu_2} = 0.1$ при 300 К. Таким образом, проведенная оценка показывает, что при 100 К приближение адатома Со к ступени с стороны верхней террасы практически невозможно.

Такие же рассуждения можно провести и для случая перемешивания адатомов Со с атомами ступени, поскольку барьер этого события равен 120 meV [21]. При комнатной температуре вероятности уже одного порядка, поэтому адатомы Со будут подходить как с нижней, так и с верхней террасы, кроме того будет происходить и перемешивание с атомами ступени, что и наблюдается в экспериментах [12, 39].

Теперь рассмотрим одномерную цепочку атомов возле ступени. В рассматриваемой одномерной модели взаимодействия атомов кобальта на вицинальной поверхности упростим вид потенциала взаимодействия, сведя его от непарного потенциала Росато-Жиллоп-Легранд к парному модифицированному потенциалу Леннарда-Джонса (рис. 3.2), варьируя значения параметров A , d_0 и Δ в уравнении (2.15) так, чтобы аппроксимация им потенциала РЖЛ была максимально точной. В отличие от потенциала РЖЛ модифицированный потенциал Леннарда-Джонса имеет меньше параметров, что позволяет значительно упростить задачу нахождения критических параметров потенциала, при которых будет происходить димеризация атомной проволоки.

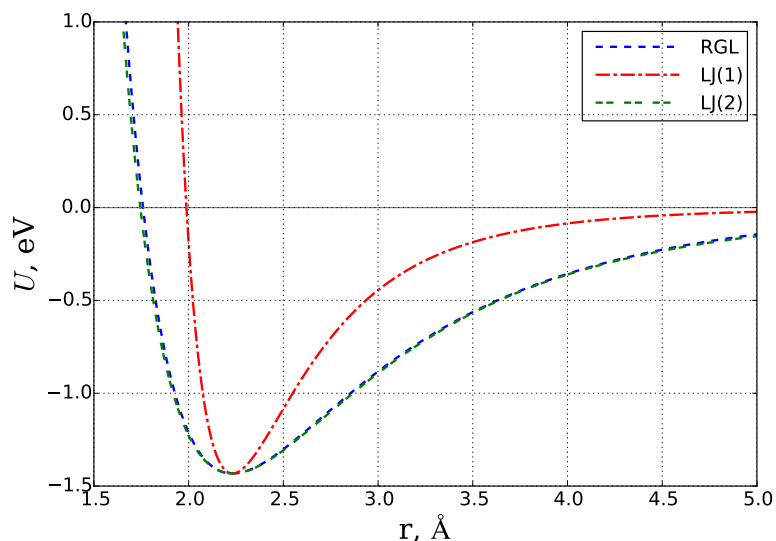


Рис. 3.2. Потенциал Росато-Жиллоп-Легранд (RGL), (LJ1) – немодифицированный потенциал Леннарда-Джонса, (LJ2) – модифицированный потенциал Леннарда-Джонса

С использованием модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (2.15) были найдены некоторые критические значения параметров, при которых атомная проволока распадается на небольшие цепочки (см. рис. 3.3). Здесь и далее 1 молекулярнодинамический (МД) шаг = $2.5 \cdot 10^{-14}$ с. Рассматривая динамику процесса, видно, что сначала проволока димеризуется, и впоследствии димеры объединяются в более крупные цепочки. Как видно из рисунка 3.4, энергетически состояние разбитой на кластеры по 3–5 атомов проволоки лежит ниже, чем состояние димеризованной проволоки. Следуя за энергией системы, видно, что хотя процесс димеризации проволоки энергетически выгоден (он происходит в течение приблизительно 5000 МД шагов ($\sim 10^{-11}$ с), возникновение более крупных образований предпочтительнее. Также следует отметить, что процесс коалесценции димеров начинается с концов проволоки, причем примерно одновременно с обеих сторон.

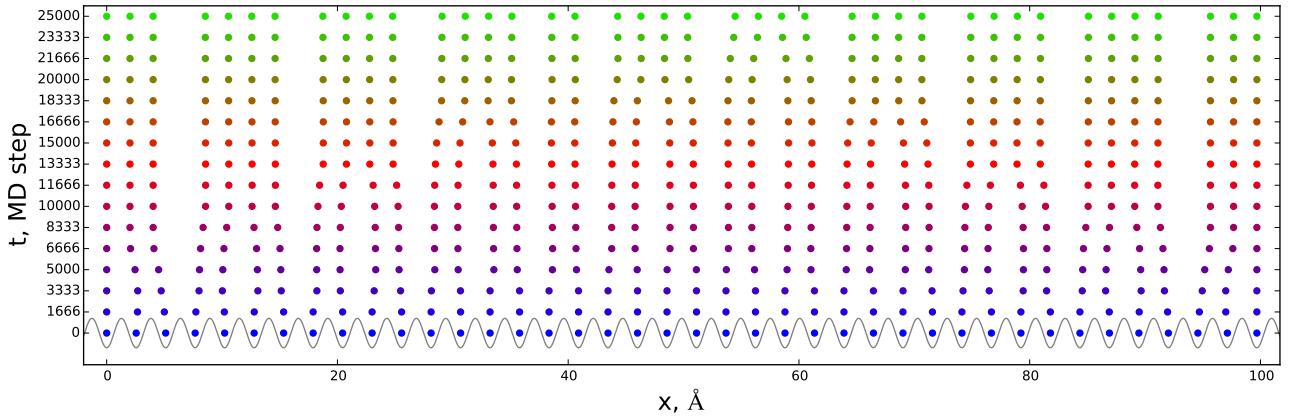


Рис. 3.3. Коалесценция атомной проволоки (ось времени направлена вверх). Синусоида качественно отражает гармонический потенциал.

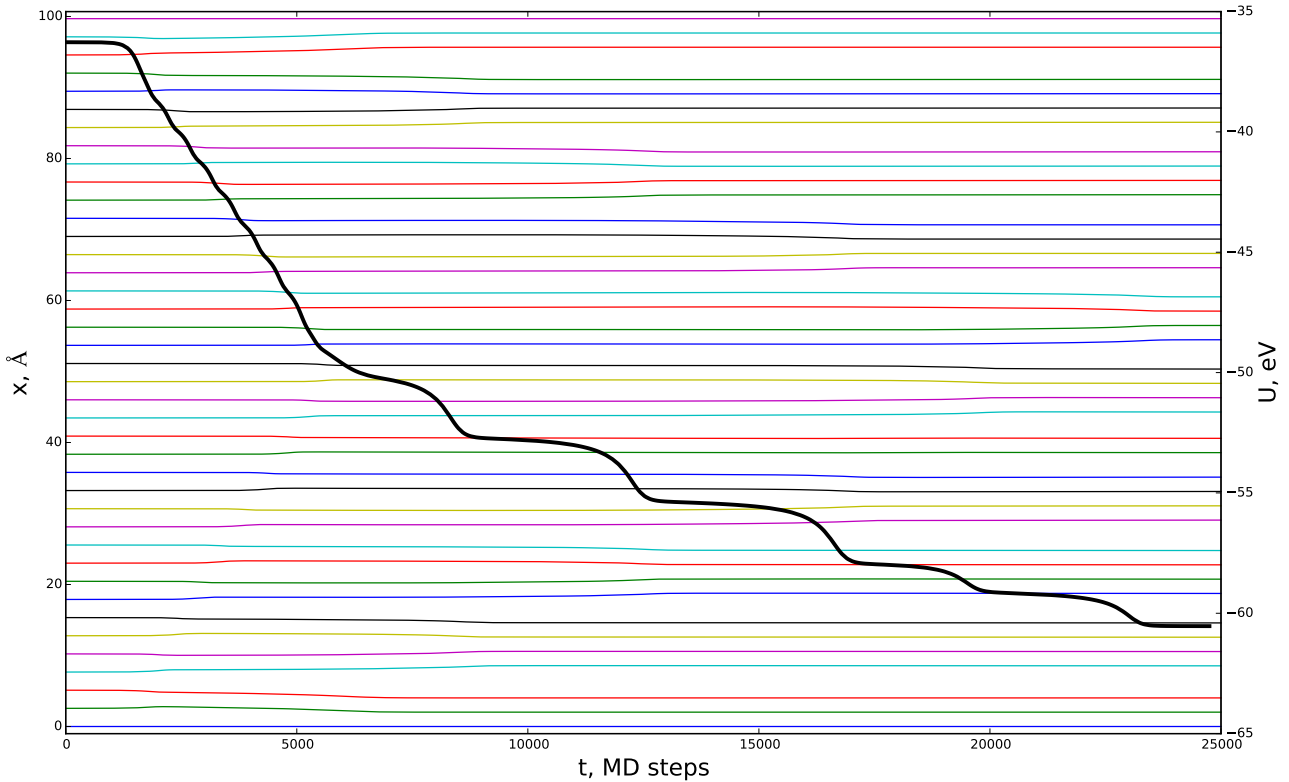


Рис. 3.4. Эволюция системы во времени. Тонкие линии отражают положения атомов, жирная черная линия — суммарная энергия системы. По оси абсцисс отложено время в МД шагах (1 МД шаг = $2.5 \cdot 10^{-14}$ с).

Теперь рассмотрим атомную проволоку кобальта, в которой атомы разбиты на пары с одинаковым направлением спина, а пары атомов имеют антиферромагнитное упорядочение. Различие во взаимодействии атомов с параллельным и антипараллельным направлением спина приводит к формированию димеров в проволоке для следующих параметров

потенциала $A_{\uparrow\uparrow} = -0.9$ eV для атомов с коллинеарным направлением спина, $A_{\uparrow\downarrow} = -0.7$ eV для атомов с антиколлинеарным направлением спина. Параметры значения минимумов потенциалов были взяты из расчетов методом функций Грина Корринги-Кона-Ростокера. Как следует из рисунков 3.5 и 3.6, процесс установления стабильной конфигурации происходит по-иному, чем в предыдущем случае — димеризация длится всего около 500 МД шагов ($\sim 1.2 \cdot 10^{-12}$ с), а дальнейший процесс коалесценции атомов происходит гораздо дольше: устойчивое положение достигается в течение примерно 60000 МД шагов ($\sim 1.5 \cdot 10^{-9}$ с). Еще одно существенное отличие состоит в том, что процесс коалесценции происходит почти одновременно по всей длине провода, что возможно проиллюстрировать, построив “карту потенциалов” для данных системы и значений параметров. На рисунке 3.7 изображена начальная расчетная конфигурация — атомы расположены эквидистантно. Рассмотрим левую половину рисунка, для правой рассуждения аналогичны. Атом на краю проволоки в таком потенциале начнет двигаться вправо, остальные расположены неустойчиво на потенциальных “горбиках” в середине глубоких потенциальных “ущелей”; в результате движения крайнего атома, “горбик” в ближайшем “ущелье” опустится, давая второму атому скатиться влево, в более глубокий минимум. Следовательно, в следующем “ущелье” левая впадина поднимется и третий атом сдвинется вправо: начнется цепная реакция. “Карта потенциалов” для стабильной конфигурации изображена на рисунке 3.8.

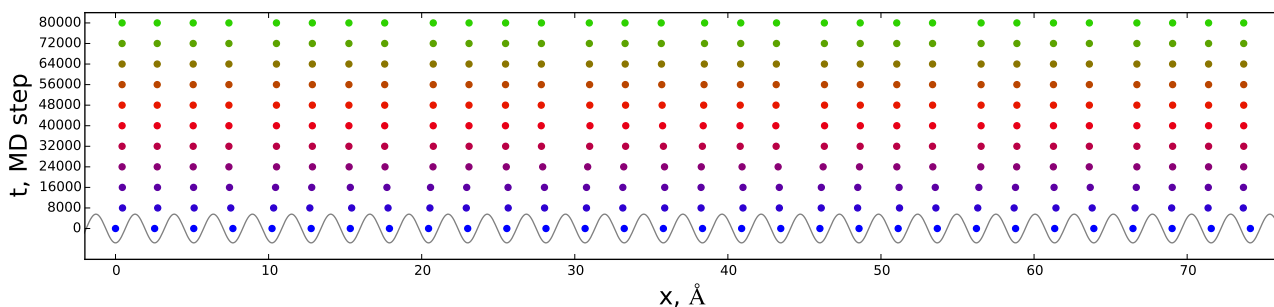


Рис. 3.5. Димеризация атомной проволоки, имеющей антиферромагнитное упорядочение. Синусоида качественно отражает гармонический потенциал. $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.89$ eV

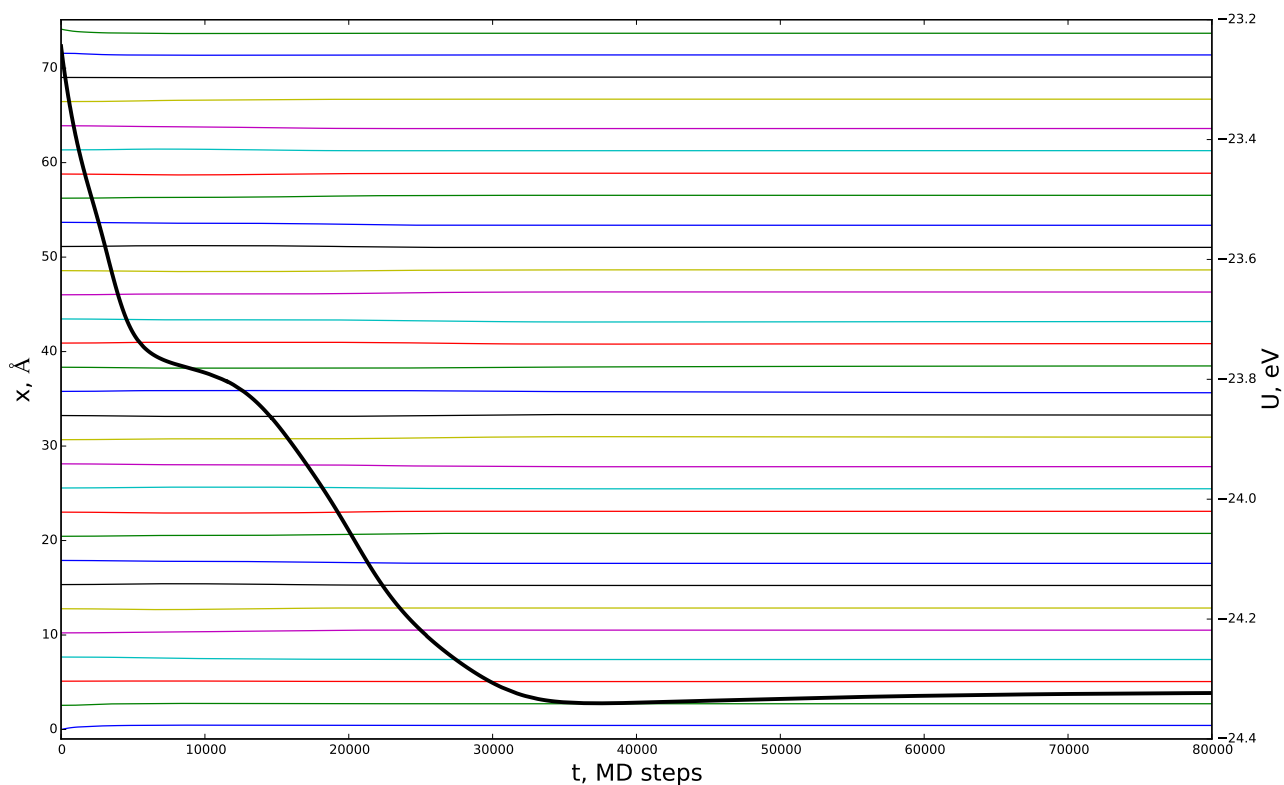


Рис. 3.6. Эволюция системы во времени. Тонкие линии отражают положения атомов, жирная черная линия – суммарная энергия системы. По оси абсцисс отложено время в МД шагах (1 МД шаг = $2.5 \cdot 10^{-14}$ с). $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.7$ eV

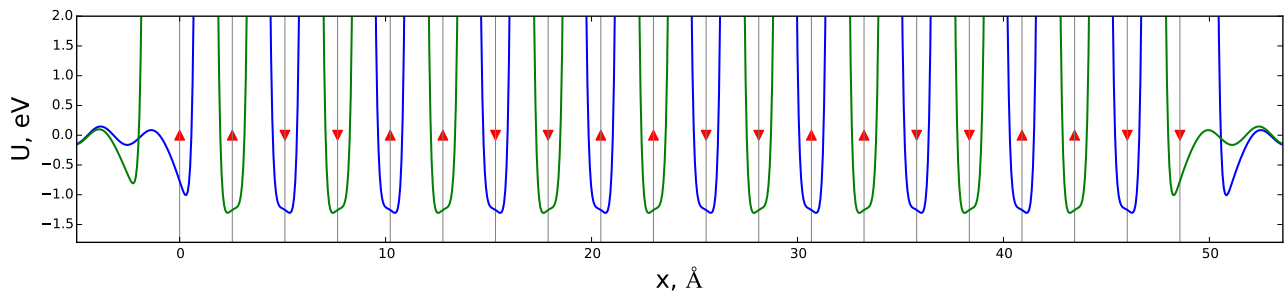


Рис. 3.7. Карта потенциалов для атомной проволоки, имеющей антиферромагнитное упорядочение. Начальная конфигурация. $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.7$ eV

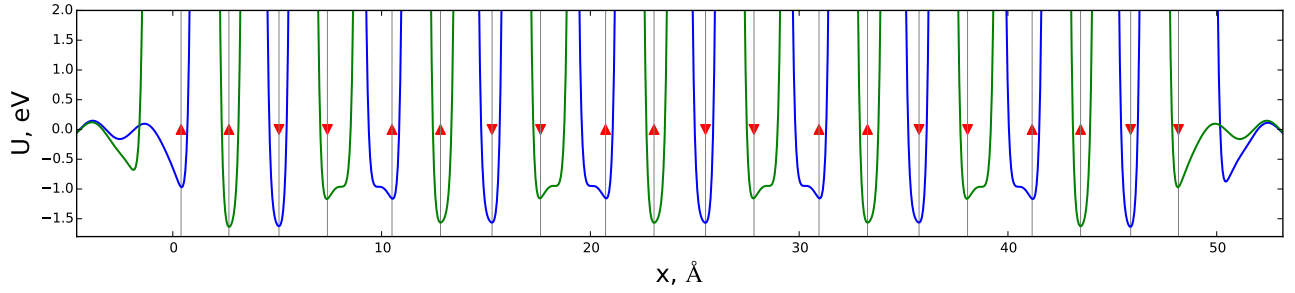


Рис. 3.8. Карта потенциалов для атомной проволоки, имеющей антиферромагнитное упорядочение. Конечная конфигурация. $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.7$ eV

При изменении отношения положения минимума потенциала и периода гармонического потенциала, описывающего взаимодействие с металлической подложкой, в большую сторону — модель растянутой подложки, начинают устойчиво образовываться димеры (рис. 3.9). Как видно из рисунка 3.10, процесс вообще происходит гораздо быстрее, финальная конфигурация достигается за ~ 4000 МД шагов ($\sim 1 \cdot 10^{-10}$ с). Процесс димеризации происходит подобным образом, как и в предыдущем случае, что иллюстрируется рисунками 3.11, 3.12.

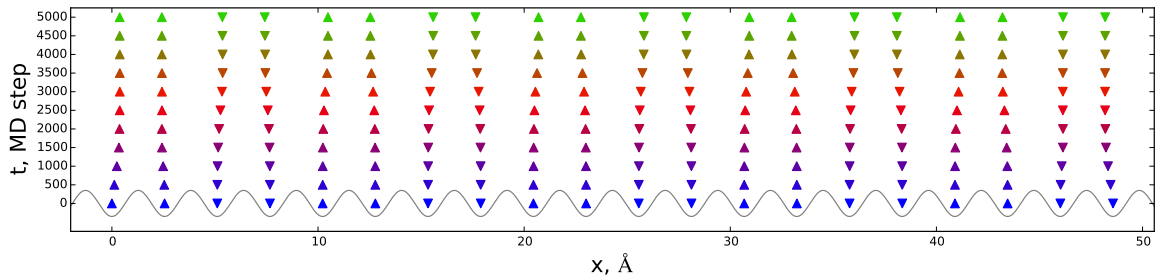


Рис. 3.9. Эволюция системы во времени в некоторые промежутки времени (ось времени направлена вверх). Синусоида качественно отражает гармонический потенциал. $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.89$ eV

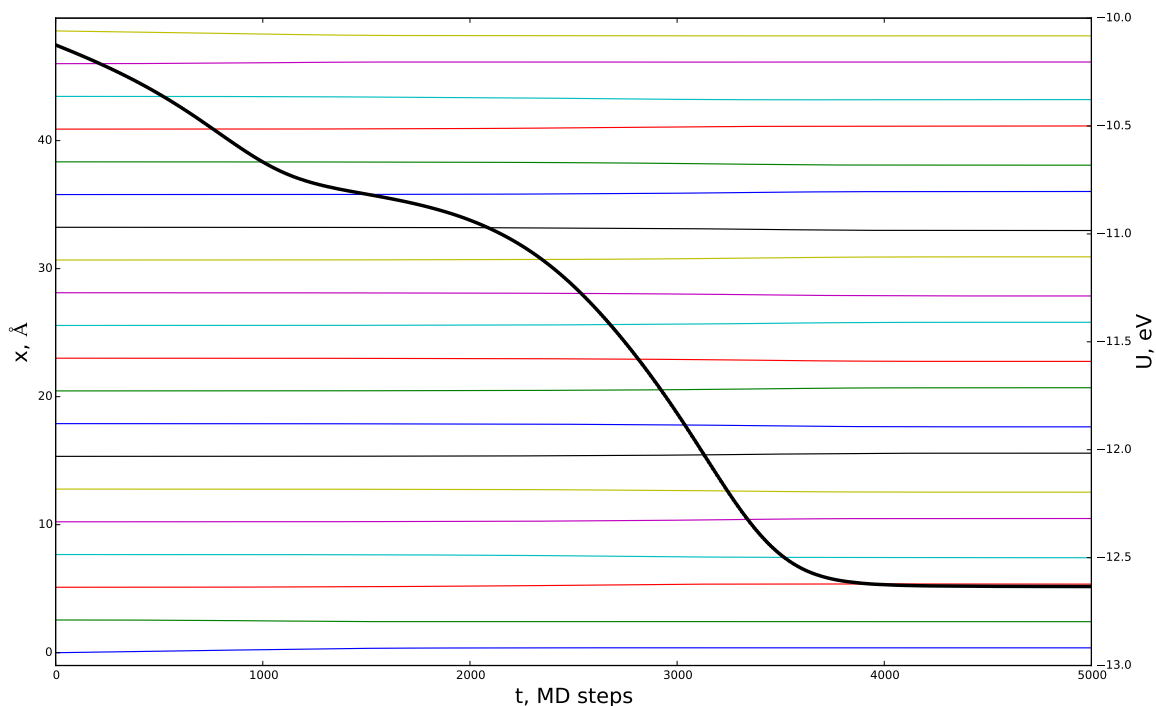


Рис. 3.10. Эволюция системы во времени. Тонкие линии отражают положения атомов, жирная черная линия – суммарная энергия системы. По оси абсцисс отложено время в МД шагах (1 МД шаг = $2.5 \cdot 10^{-14}$ с). $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.89$ eV

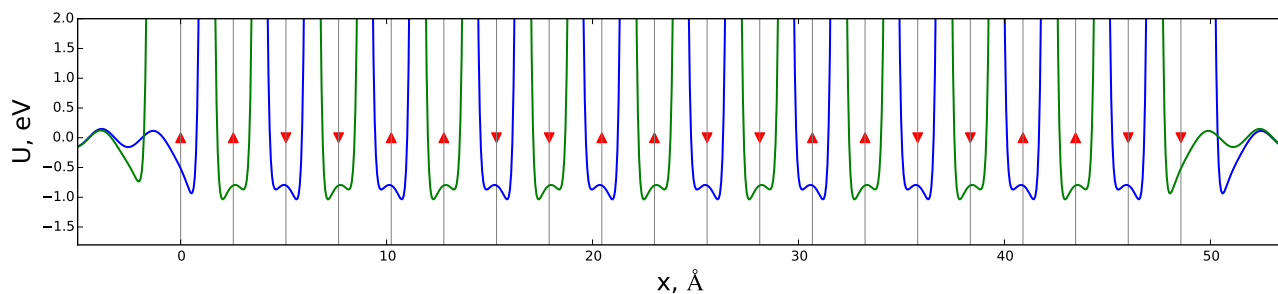


Рис. 3.11. Карта потенциалов для атомной проволоки, имеющей антиферромагнитное упорядочение. Начальная конфигурация. $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.89$ eV

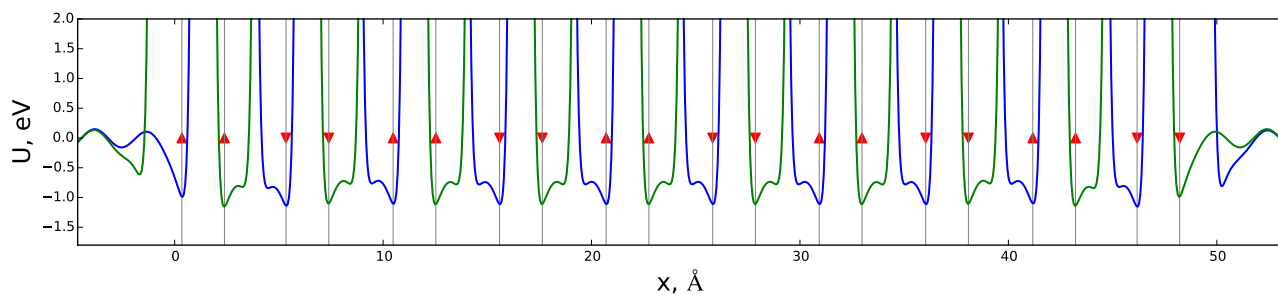


Рис. 3.12. Карта потенциалов для атомной проволоки, имеющей антиферромагнитное упорядочение. Конечная конфигурация. $A_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ eV, $A_{\uparrow\downarrow} = 0.89$ eV

Глава 4

Выводы

- Показано, что перераспределением заряда на краю ступени приводит к отличию взаимодействия адатома Co со ступенью на нижней и верхней террасах vicинальной поверхности Cu(111). Отталкивающий барьер ступени на верхней террасе равен ~ 135 meV, а на нижней ~ 107 meV.
- Установлено, что различие в отталкивающем барьере для адатомов 3d металлов со ступенью на нижней и верхней террасах приводит к тому, что при температурах порядка 100 K формирование наноструктур будет происходить с нижней стороны ступени, а при комнатной температуре формирование наноструктур будет происходить через погружение адатомов возле ступени, что и наблюдается в экспериментах.
- Была предложена модельная задача, для которой были найдены критические значения параметров, при которых атомная проволока распадается на небольшие цепочки. Показано, что при антиферромагнитном упорядочении атомов в цепочке возможна ее димеризация.
- В модельной задаче продемонстрировано, что при небольшой деформации подложки предпочтительна димеризация атомной проволоки с дальнейшей коалесценцией димеров и образованием структур, состоящих из 3-5 атомов.

Литература

- [1] Фейнман Ричард Ф. Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир // Химия и жизнь - XXI век. — 2002. — Т. 12. — С. 20–26.
- [2] Intel. — Intel Timeline: A History of Innovation.
- [3] Borkar Rani, Bohr Mark, Jourdan Stephan. — Advancing Moore’s Law in 2014. — Intel, 2014.
- [4] A Quarter Century of Disk File Innovation / John M. Harker, Dwight W. Brede, Robert E. Pattison et al. // IBM Journal of Research and Development. — 1981. — Vol. 25, no. 5. — P. 677–690.
- [5] Bit Patterned Media at 1 Tdot/in² and Beyond / T.R. Albrecht, D. Bedau, E. Dobisz et al. // Magnetics, IEEE Transactions on. — 2013. — Vol. 49, no. 2. — P. 773–778.
- [6] Terabit inch⁻² ferroelectric data storage using scanning nonlinear dielectric microscopy nanodomain engineering system / Y Cho, K Fujimoto, Y Hiranaga et al. // Nanotechnology. — 2003. — Vol. 14, no. 6. — P. 637.
- [7] R. Fontana G. Decad. — Volumetric density trends (TB/in³) Tape, HDD, NAND flash, Blu-Ray. — IBM Systems and Technology Group, 2014.
- [8] Kryder M.H., Kim Chang Soo. After Hard Drives – What Comes Next? // Magnetics, IEEE Transactions on. — 2009. — Vol. 45, no. 10. — P. 3406–3413.
- [9] Surface etching and enhanced diffusion during the early stages of the growth of Co on Cu(111) / J. de la Figuera, J.E. Prieto, C. Ocal, R. Miranda // Surface Science. — 1994. — Vol. 307–309, Part A, no. 0. — P. 538–543.
- [10] Fabrication of magnetic quantum wires by step-flow growth of cobalt on copper surfaces / J. de la Figuera, M. A. Huerta-Garnica, J. E. Prieto et al. // Applied Physics Letters. — 1995. — Vol. 66, no. 8. — P. 1006–1008.

- [11] Growth of Co on Cu(111): subsurface growth of trilayer Co islands / M.Ø. Pedersen, I.A. Bönicke, E. Laegsgaard et al. // *Surface Science*. — 1997. — Vol. 387, no. 1–3. — P. 86–101.
- [12] Step edge growth of Co nanoislands on Cu(111) surface / H. W. Chang, F. T. Yuan, Y. D. Yao et al. // *Journal of Applied Physics*. — 2006. — Vol. 100, no. 8. — P. 084304.
- [13] Spin-Resolved Electronic Structure of Nanoscale Cobalt Islands on Cu(111) / O. Pietzsch, S. Okatov, A. Kubetzka et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96. — P. 237203.
- [14] Cochran William. The structure of some metallic deposits on a copper single crystal as determined by electron-diffraction // *Proceedings of the Physical Society*. — 1936. — Vol. 48, no. 5. — P. 723.
- [15] Prieto J. E., de la Figuera J., Miranda R. Surface energetics in a heteroepitaxial model system: Co/Cu(111) // *Phys. Rev. B*. — 2000. — Vol. 62, no. 3. — P. 2126–2133.
- [16] Low-temperature deposition of Co on Cu(111): effects on step etching / S Speller, S Degroote, J Dekoster et al. // *Surface Science*. — 1998. — Vol. 405, no. 2–3. — P. L542 – L548.
- [17] Scanning-tunneling-microscopy study of the growth of cobalt on Cu(111) / J. de la Figuera, J. E. Prieto, C. Ocal, R. Miranda // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Vol. 47. — P. 13043–13046.
- [18] Formation of monatomic Fe chains on vicinal Cu(111) surfaces: An atomistic view / Jiandong Guo, Yina Mo, Efthimios Kaxiras et al. // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Vol. 73. — P. 193405.
- [19] Atom-wide Co wires on Cu(775) at room temperature / Nader Zaki, Denis Potapenko, Peter D. Johnson, Richard M. Osgood // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Vol. 80. — P. 155419.
- [20] Experimental observation of spin-exchange-induced dimerization of an atomic one-dimensional system / Nader Zaki, Chris A. Marianetti, Danda P. Acharya et al. // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 87. — P. 161406.
- [21] Kinetic Pathway for the Formation of Fe Nanowires on Stepped Cu(111) Surfaces / Yina Mo, Kalman Varga, Efthimios Kaxiras, Zhenyu Zhang // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94. — P. 155503.

- [22] Self-organized long-period adatom strings on stepped metal surfaces: Scanning tunneling microscopy, *ab initio* calculations, and kinetic Monte Carlo simulations / H. F. Ding, V. S. Stepanyuk, P. A. Ignatiev et al. // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 76. — P. 033409.
- [23] О. М. Браун В. К. Медведев. Взаимодействие между частицами, адсорбированными на поверхности металлов // Успехи физических наук. — 1989. — Т. 157. — С. 631–666.
- [24] Ruderman M. A., Kittel C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons // Phys. Rev. — 1954. — Vol. 96. — P. 99–102.
- [25] Langer J.S., Vosko S.H. The shielding of a fixed charge in a high-density electron gas // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1960. — Vol. 12, no. 2. — P. 196–205.
- [26] Friedel J. Metallic alloys // Il Nuovo Cimento. — 1958. — Vol. 7, no. 2. — P. 287–311.
- [27] Canel E., Matthews M.P., Zia R.K.P. Screening in very thin films // Physik der kondensierten Materie. — 1972. — Vol. 15, no. 3. — P. 191–200.
- [28] Das Amal K. The linear response of a one-dimensional electron gas // Solid State Communications. — 1974. — Vol. 15, no. 3. — P. 475–477.
- [29] Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. — Москва “Наука”, главная редакция физико-математической литературы, 1990.
- [30] M. C. Roco R. S. Williams, Alivisatos P. Nanotechnology Research Directions: IWGN Workshop Report. — Kluwer academic publishers, 2002.
- [31] Nikolic Branislav K. — Numerical Integration of Newton’s Equations: Finite Difference Methods. — Department of Physics and Astronomy University of Delaware.
- [32] Брагин М.Д. Иванов А. В. Локально-адаптивный выбор шага интегрирования в задачах молекулярной динамики // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. — 2013. — Т. 62. — С. 39.
- [33] Beeman D. Some multistep methods for use in molecular dynamics calculations // Journal of Computational Physics. — 1976. — Vol. 20, no. 2. — P. 130–139.
- [34] Verlet Loup. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys. Rev. — 1967. — Vol. 159. — P. 98–103.

- [35] Batcho Paul F., Schlick Tamar. Special stability advantages of position-Verlet over velocity-Verlet in multiple-time step integration // The Journal of Chemical Physics. — 2001. — Vol. 115, no. 9. — P. 4019–4029.
- [36] Martins T. B., Fazzio A., da Silva Antônio J. R. Organic molecule assembled between carbon nanotubes: A highly efficient switch device // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 79. — P. 115413.
- [37] Smoluchowski R. Anisotropy of the Electronic Work Function of Metals // Phys. Rev. — 1941. — Vol. 60. — P. 661–674.
- [38] Сыромятников А. Г., Клавсюк А. Л., Салецкий А. М. Исследование взаимодействия адатомов Со на вицинальной поверхности Cu(111) // Письма в ЖЭТФ. — 2014. — Т. 100, № 1. — С. 24–27.
- [39] Formation of one-dimensional ordered alloy at step edges: An atomistic study of the (2×1) Ni/Pt alloy on the Pt(997) surface / Wafa Essolaani, Fabien Picaud, Christophe Ramseyer et al. // Surface Science. — 2011. — Vol. 605, no. 9–10. — P. 917–922.

Список публикаций

- [1] Сыромятников А. Г., Клавсюк А. Л., Салецкий А. М. Исследование взаимодействия адатомов Со на вицинальной поверхности Cu(111) // Письма в ЖЭТФ. — 2014. — Т. 100, № 1. — С. 24–27.
- [2] Andrey Klavsyuk, Aleksey Syromjatnikov, Nikolay Kabanov, Alexander Saletsky. Atomic one-dimensional system stabilized by surface-state electrons // Proceedings of the European Conference on Surface Science (ECOSS 30). — Antalya, Turkey — 2014. — P. 617.
- [3] Сыромятников А. Г. Определение структуры нанопроводов Со на вицинальной поверхности Cu(111) методом молекулярной динамики // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2015» / Отв. ред. А.И. Андреев, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов. [Электронный ресурс] — М.: МАКС Пресс, 2015. ISBN 978-5-317-04946-1