

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Колесников Сергей Владимирович

**САМООРГАНИЗАЦИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР НА
ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ**

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико–математических наук

Москва – 2021

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Научный консультант: САЛЕЦКИЙ АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ,
доктор физико–математических наук, профессор,
МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет, заведующий кафедрой общей физики.

Официальные оппоненты: ОРЕШКО АЛЕКСЕЙ ПАВЛОВИЧ,
доктор физико–математических наук, доцент,
МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела, профессор;
ПЯТАКОВ АЛЕКСАНДР ПАВЛОВИЧ,
доктор физико–математических наук, профессор
РАН, МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики колебаний, профессор;
СЕМЕНОВ МИХАИЛ БОРИСОВИЧ,
доктор физико–математических наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Пензенский государственный университет», заведующий кафедрой «Физика».

Защита состоится «25» ноября 2021г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета МГУ.01.01 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр.2, МГУ, физический факультет, ауд. _____

E-mail: laptin@polly.phys.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на сайте ИАС ИСТИНА <https://istina.msu.ru/dissertations/389103749/>

Автореферат разослан « __ » сентября 2021 года.

Ученый секретарь

Диссертационного совета МГУ.01.01

кандидат физико–математических наук

Т.В. Лаптинская

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Исследование формирования и физических свойств наноструктур является одной из актуальных задач современной физики. Необходимость подобных исследований связана со следующими двумя причинами. Во-первых, использование наноструктур в технических целях очень перспективно с точки зрения создания новых средств хранения, обработки и передачи информации, создания новых наноструктурированных материалов с заданными физическими свойствами, новых катализаторов, лекарственных препаратов и т.д. Во-вторых, исследование свойств одномерных и двумерных наноструктур открывает путь к исследованию фундаментальных законов статистической физики и квантовой механики, которые для низкоразмерных систем могут кардинально отличаться от привычных нам законов в трехмерном пространстве. Исследование наноструктур на поверхности металлов и, в частности, меди занимает видное место в физике наноструктур. Ежегодно по данной тематике публикуются тысячи научных работ, в том числе в таких престижных журналах, как Science и Nature. Следует особо отметить, что проведение экспериментов в данной области требует использования дорогостоящего оборудования, а теоретические методы, как правило, настолько сложны, что задачи редко удается решать в аналитическом виде. В этих условиях важную роль играет компьютерное моделирование, которое, с одной стороны, позволяет разобраться в фундаментальных основах происходящих явлений, а, с другой стороны, может подсказать экспериментаторам наилучшие условия для проведения экспериментов.

Цель и задачи работы. Основная цель работы – исследование на атомном уровне процессов формирования наноструктур и сплавов на по-

верхности меди, выявление оптимальных условий их формирования и определение механических и магнитных свойств этих структур. Для достижения основной цели были поставлены *следующие задачи*:

1. Разработать комплекс программ, позволяющий моделировать самоорганизацию наноструктур на поверхности металла и исследовать их физические свойства.
2. Разработать аналитический метод, позволяющий исследовать магнитные свойства одинарных и двойных атомных цепочек на поверхности металлов.
3. Провести исследования
 - самоорганизации малых кластеров из атомов Co и Fe на поверхности Cu(001);
 - формирования компактных кластеров и плоских дендритов из атомов Pt и Cu на поверхности Cu(111);
 - атомных процессов, приводящих к формированию поверхностного сплава Pt/Cu и фазовым переходам в нем;
 - взаимодействия между поверхностью меди и атомами углерода, приводящего к появлению муаровой структуры графена на поверхности Cu(111);
 - электромиграции малых вакансионных кластеров на идеальной и дефектной поверхности Cu(001);
 - механизмов диффузии атомов Co в приповерхностной области Cu(001);
 - атомных процессов, приводящих к формированию поверхностных вакансий при взаимодействии поверхности с иглой

сканирующего туннельного микроскопа;

- магнитных свойств одинарных и двойных ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек конечной длины на поверхности металлов.

Объекты и предмет исследования. Объектом исследования являются наноструктуры на поверхности меди. Выбор меди в качестве подложки обусловлен двумя причинами. Во-первых, медь является единственным элементом среди d-металлов первого переходного ряда, который встречается в природе в свободном виде, что делает подложки из меди относительно недорогими по сравнению с подложками из других переходных металлов. Во-вторых, медь обладает рядом уникальных физических свойств, среди которых высокие значения электропроводности (второе место среди переходных металлов после серебра), теплопроводности и пластичности. Высокая концентрация поверхностных вакансий открывает возможность выращивания на поверхности меди погруженных наноструктур, а поверхностные сплавы меди активно используются в химической промышленности в качестве катализаторов. Кроме того, было обнаружено, что подложки из меди являются перспективными с точки зрения выращивания на них графена высокого качества.

В работе исследованы наноструктуры из атомов кобальта, железа и платины. Выбор этих элементов не случаен. Наноструктуры из железа и кобальта обладают ярко выраженными магнитными свойствами на и в поверхности меди, они перспективны с точки зрения развития наноэлектроники и дальнейшей миниатюризации носителей информации. Платина является очень активным катализатором многих химических реакций, что делает поверхностные сплавы платина-медь перспективными для химической промышленности.

Предметом исследования являются самоорганизация и физические свойства различных наноструктур на подложках меди. Самоорганизация наноструктур на поверхности металлов является наиболее дешевым и, как следствие, наиболее перспективным методом получения наносплавов и наноструктурированных поверхностей в промышленных масштабах. Однако возможность самоорганизации тех или иных структур существенно зависит от внешних условий, поэтому исследование механизмов и условий формирования наноструктур и наносплавов является важнейшей задачей, как с фундаментальной, так и с практической точки зрения.

Среди многочисленных физических свойств наноструктур особое место занимают их магнитные свойства, что связано с перспективами их применения в наноэлектронике, устройствах записи и хранения информации, датчиках магнитного поля. Поэтому исследованию магнитных свойств наноструктур в диссертационной работе уделено повышенное внимание.

Научная новизна. В диссертационной работе впервые получены следующие научные результаты:

1. Разработан комплекс программ, позволяющий моделировать самоорганизацию наноструктур и поверхностных сплавов на идеальных и дефектных поверхностях гцк металлов при различных температурах и внешних силовых полях.
2. Предложен новый аналитический метод, позволяющий исследовать магнитные свойства одинарных и двойных атомных цепочек конечной длины на поверхностях металлов, в том числе вычислять времена спонтанного и вынужденного перемагничивания цепочек, строить кривые намагничивания, вычислять коэрцитивную силу.

3. Определены основные атомные процессы, отвечающие за самоорганизацию малых кластеров из атомов Co и Fe на поверхности Cu(001) и в её первом приповерхностном слое. Выявлено влияние температуры подложки, скорости осаждения атомов и их концентрации на эволюцию поверхности. Определены магнитные свойства наноструктурированной поверхности меди.
4. Установлены основные атомные процессы, отвечающие за самоорганизацию компактных кластеров и плоских дендритов из атомов Pt и Cu на поверхности Cu(111). Исследовано влияние температуры подложки, скорости осаждения атомов и их концентрации на эволюцию системы атомов. Определена структура поверхностного сплава Pt-Cu, формирующегося вблизи краев компактных кластеров, а также фрактальная размерность плоских дендритов.
5. Исследованы процессы формирования поверхностного сплава Pt/Cu. Установлено влияние температуры подложки, скорости осаждения атомов и их концентрации на эволюцию поверхностного сплава. Объяснено формирование пальцеобразных выступов на поверхности Cu(111). В поверхностном сплаве Pt/Cu(001) обнаружен и исследован фазовый переход порядок-беспорядок. Определен механизм растворения кластеров Pt в первом слое поверхности Cu(001).
6. Предложены оптимальные параметры потенциала Леннарда-Джонса, описывающие взаимодействие между графеном и поверхностью Cu(111). Обнаружено, что расстояние между графеном и поверхностью линейно возрастает с увеличением температуры. Предложен новый вид потенциалов для описания

взаимодействия между графеном и атомами меди, позволяющий точно воспроизводить муаровую структуру графена на поверхности Cu(111).

7. Исследована электромиграция малых вакансионных кластеров на идеальной и дефектной поверхности Cu(001). Обнаружена и объяснена осцилляционная зависимость скорости электромиграции вакансионных кластеров от их размера. Изучено влияние точечных дефектов, расположенных в первом приповерхностном слое меди, на скорость электромиграции вакансионных кластеров.
8. Определены основные атомные процессы, отвечающие за диффузию атомов Co в приповерхностной области Cu(001). Предложена диффузионная модель, описывающая погружение атомов Co в приповерхностные слои Cu(001) и дающая количественное согласие с экспериментальными данными.
9. Исследовано формирование вакансий на поверхности Cu(001) при её взаимодействии с иглой сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Установлена зависимость скорости формирования поверхностных вакансий от скорости и направления движения СТМ иглы, а также от расстояния между СТМ иглой и поверхностью меди.
10. Определены магнитные свойства различных одинарных и двойных ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек конечной длины на поверхности металлов. Изучено влияние размерного и краевых эффектов на магнитные свойства атомных цепочек. Исследовано перемагничивание атомных цепочек во внешнем магнитном поле и в силовом поле иглы сканирующего туннельного микроскопа.

Научная и практическая значимость работы. Представленные в диссертационной работе результаты имеют как научную, так и практическую ценность. С научной точки зрения наибольшую ценность представляют собой результаты и методы, которые могут быть применены в дальнейших научных исследованиях. К таким результатам можно отнести найденные в работе параметры потенциала взаимодействия Pt-Cu, новый вид потенциала взаимодействия графен-медь, обобщение модели диффузионно-лимитированного роста на случай двухкомпонентных кластеров, новый аналитический метод расчета магнитных свойств ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек конечной длины, новую модель диффузии атомов Co в приповерхностных слоях меди, обнаружение фазового перехода порядок-беспорядок в поверхностном сплаве Pt/Cu и предсказание осцилляционной зависимости скорости электромиграции малых вакансионных кластеров от их размера.

Практическую ценность имеют, в первую очередь, результаты исследования самоорганизации наноструктур и формирования поверхностных сплавов при различных внешних условиях. В частности, в диссертационной работе были определены условия формирования кластеров Fe и Co на поверхности Cu(001), связанных наноструктур из атомов Fe и Co в первом слое поверхности Cu(001), плоских дендритов из атомов Pt и Cu и пальцеобразных выступов на поверхности Cu(111), поверхностных сплавов Pt/Cu(001) и Pt/Cu(111). Эти результаты могут быть полезны экспериментаторам, занимающимся выращиванием компактных наноструктур и поверхностных сплавов, в том числе для их технического применения. Так кластеры из атомов Co и Fe могут быть использованы для создания запоминающих устройств, а поверхностные сплавы

платина-медь применяются в химической промышленности в качестве катализаторов.

Работа выполнялась при финансовой поддержке РФФИ (гранты 15-32-20560, 12-02-31115 и 10-02-01274) и РНФ (проект 21-72-20034). Полученные результаты могут представлять научный и практический интерес для ряда научно-исследовательских организаций и институтов РАН, таких как МФТИ, ИФТТ РАН, ИОФАН, МИРЭА, ФИАН, МИЭТ, ИФТ РАН и т.д.

Положения, выносимые на защиту.

1. Разработанный метод моделирования на основе самообучающегося алгоритма Монте-Карло высокоэффективен для исследования самоорганизации наноструктур и поверхностных сплавов как для идеальных, так и для дефектных поверхностей металлов при различных температурах и внешних силовых полях.
2. Предложенный аналитический метод изучения магнитных свойств атомных цепочек позволяет определять времена спонтанного и вынужденного перемагничивания одинарных и двойных цепочек, строить кривые намагничивания, вычислять коэрцитивную силу как одинарных, так и двойных цепочек.
3. Самоорганизация атомов Со на поверхности Cu(001) происходит путем формирования двухслойных кластеров кобальта, которое происходит в две стадии. На первой стадии образуются кластеры в первом слое, с одновременным уменьшением числа атомов во втором слое. На второй стадии происходит формирование второго слоя до полного покрытия атомами первого слоя.
4. На поверхности Cu(111) при комнатной температуре формируются

два типа кластеров из атомов Pt и Cu. Это компактные кластеры Pt–Cu, расположенные вблизи атомных ступеней, которые образуются в результате отрыва пальцеобразных выступов от ступени и плоские дендриты из атомов Pt и Cu вдали от атомных ступеней с фрактальной размерностью логарифмически убывающей с увеличением скорости осаждения атомов и возрастающей с увеличением температуры.

5. Поверхностный сплав Pt/Cu(111) при осаждении платины на поверхность Cu(111) при температуре выше 285 К формируется с образованием пальцеобразных выступов различной длины. В поверхностном сплаве Pt/Cu(001) при температурах 300–400 К происходит фазовый переход порядок-беспорядок. При этом время релаксации поверхностного сплава экспоненциально зависит от концентрации атомов Pt и растет с понижением температуры.
6. Корректное моделирование муаровой структуры графена на поверхности Cu(111) возможно с использованием нового потенциала на основе потенциала Морзе. Полученная с использованием нового потенциала муаровая структура качественно согласуется с СТМ изображениями, а толщина муаровой структуры и энергия связи графена с поверхностью меди в пределах погрешности совпадает с экспериментальными данными.
7. Осцилляционная зависимость скорости дрейфа при электромиграции малых вакансионных кластеров от их размера обусловлена различием механизмов диффузии «быстрых» и «медленных» кластеров. Влияние примеси на электромиграцию вакансионных кластеров сводится к уменьшению их скорости дрейфа и существенно

зависит от того, образуются ли компактные кластеры из атомов примеси.

8. Диффузия атомов Со в приповерхностной области при температуре ниже 800 К происходит преимущественно по вакансионному механизму. Предложенная диффузионная модель количественно описывает погружение атомов Со в приповерхностную область.
9. Взаимодействие между поверхностью Cu(001) и СТМ иглой приводит к локальному увеличению скорости образования поверхностных вакансий, которое зависит как от направления, так и от скорости перемещения иглы. Максимальное увеличение скорости образования вакансий достигается при расстоянии 3.0 \AA между поверхностью и СТМ иглой.
10. Магнитные свойства атомных цепочек конечной длины на поверхности металлов, в первую очередь скорости их перемагничивания, существенно зависят от их размера и краевых эффектов.

Степень достоверности и апробация результатов.

Представленные в диссертационной работе результаты получены с использованием современных методов компьютерного моделирования и теоретической физики. Физика является экспериментальной наукой, поэтому степень достоверности теоретических результатов определяется, в первую очередь, сравнением этих результатов с экспериментальными данными. Большая часть результатов, представленных в диссертационной работе, находится в количественном или хорошем качественном согласии с экспериментальными данными, опубликованными в ведущих мировых научных журналах. Часть полученных результатов находится в хорошем согласии с теоретическими и компьютерными

исследованиями других научных групп, их достоверность также не вызывает сомнения. Наконец, в диссертационной работе предсказан ряд новых эффектов, не наблюдавшихся до сих пор экспериментально и не обсуждавшихся в статьях других авторов. Эти результаты также можно считать с большой вероятностью достоверными, поскольку они получены в рамках тех же методов и тех же приближений, что и экспериментально подтвержденные результаты.

Результаты диссертационной работы неоднократно докладывались и обсуждались на российских и международных конференциях по проблемам физики конденсированного состояния. Основные результаты диссертационной работы были представлены автором лично на следующих международных конференциях:

- 2-й международный форум «Rusnanotech 2009» (Москва, Россия, 2009);
- 27-я европейская конференция по физике поверхности ECOSS 27 (Гронинген, Нидерланды, 2010);
- международная конференция DUBNA-NANO2010 (Дубна, Россия, 2010);
- 29-я европейская конференция по физике поверхности ECOSS 29 (Эдинбург, Великобритания, 2012);
- международная конференция DUBNA-NANO2012 (Дубна, Россия, 2012);
- 32-я европейская конференция по физике поверхности ECOSS 32 (Гренобль, Франция, 2016);

- международная конференция по нанонауке и технологии ICN+T (Брно, Чехия, 2018);
- 3-я международная балтийская конференция по магнетизму IBCM-2019 (Светлогорск, Россия, 2019).

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 36 статей в рецензируемых международных научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и/или Scopus. Из них 7 статей опубликованы в журналах из списка Топ-25 по импакт-фактору по версии Thomson Reuters, таких как Physical Review B, Journal of Alloys and Compounds, Physical Chemistry Chemical Physics и Успехи физических наук. Это позволяет считать, что результаты диссертационной работы соответствуют современному мировому уровню исследований в области физики конденсированного состояния вещества, являются обоснованными и достоверными.

Личный вклад автора. Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены лично автором или при его непосредственном участии. Вклад автора в диссертационную работу является определяющим, это касается как постановки решаемых задач, так и основных идей, теоретических моделей, методов и выводов диссертационной работы.

Публикации [1-8,13,14,20,22,34,35] написаны в соавторстве с А.Л. Клавсюком. В этих работах А.Л. Клавсюком были выполнены квантовомеханические вычисления магнитных свойств и энергий связи атомов. Исследования самоорганизации наноструктур кинетическим методом Монте-Карло и механических свойств наноструктур методом классической молекулярной динамики были выполнены автором.

Публикации [11,12,17] написаны в соавторстве с К.М. Цысарь. В этих

работах К.М. Цысарь были выполнены квантовомеханические вычисления магнитных свойств отдельных атомов. Исследования коллективных магнитных свойств атомных цепочек конечной длины были выполнены автором.

Часть представленных результатов ранее вошла в кандидатскую диссертационную работу С.В. Колесникова «Исследование самоорганизации наноструктур на поверхности меди», защищенную под руководством А.М. Салецкого и А.Л. Клавсюка в 2010 году (диссертационный совет Д.501.002.01), а также в кандидатскую диссертационную работу С.А. Докукина «Исследование самоорганизации и физических свойств поверхностного сплава платина–медь», защищенную под руководством А.М. Салецкого и С.В. Колесникова в 2020 году (диссертационный совет МГУ.01.01).

Структура и содержание работы. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 395 страницах, включает в себя 121 рисунок и 13 таблиц. Общее число ссылок на литературные источники составляет 405. Каждая глава начинается с небольшой вступительной части, содержащей краткое содержание и основные задачи главы. В конце диссертационной работы сформулированы основные результаты, полученные в ней, и выводы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, поставлена цель и сформулированы задачи работы, указана ее научная новизна, научная и практическая значимость, сформулированы положения, выносимые на защиту, оценена степень достоверности результатов и личный вклад автора, приведена структура и краткое содержание работы.

Первая глава посвящена обзору литературы по теме диссертационной работы. Проанализированы экспериментальные и теоретические работы, посвященные исследованию физических свойств и методов получения различных наноструктур на поверхности металлов, таких как компактные нанокластеры, плоские дендриты, нанопровода и атомные цепочки. Рассмотрены также промежуточные экзотические объекты такие, как пальцеобразные выступы. При повышении температуры подложки атомы примеси могут погружаться в приповерхностные слои, образуя при этом либо связанные наноструктуры, либо поверхностные сплавы. Наноструктуры могут обладать различными физическими свойствами в зависимости от их формы и компонентного состава. Особое внимание уделено наноструктурированным поверхностям и поверхностным сплавам, перспективным с точки зрения их практического применения в различных областях физики и физической химии таких, как спинтроника, создание новых магнитных материалов и компактных носителей информации, квантовая передача информации и катализ. Отдельно рассмотрена возможность выращивания графена на поверхностях переходных металлов. Выращенный таким образом графен может быть затем снят с поверхности металла и перенесен на подложки другого типа, или использован каким-либо другим образом.

Для теоретического исследования формирования и свойств наноструктур на поверхности металлов используются как квантово-механические, так и классические методы. Среди квантово-механических методов следует выделить, в первую очередь, теорию функционала плотности, которая позволяет определять структурные, механические, электронные и магнитные свойства небольших наносистем, состоящих из нескольких десятков атомов. Классические методы такие, как метод

молекулярной динамики (МД) и кинетический метод Монте-Карло (КММК) позволяют моделировать наносистемы больших размеров на временах, сравнимых с экспериментальными. Среди разнообразия различных вариантов КММК следует выделить самообучающийся КММК, который сочетает в себе преимущества методов МД и КММК. Результаты, полученные самообучающимся КММК, как правило, находятся не только в хорошем качественном, но и в количественном согласии с экспериментальными данными.

Магнитные свойства одиночных атомов на поверхности металла должны безусловно описываться квантово-механическими методами. Однако при исследовании магнитных свойств атомных цепочек при температуре выше 1 К можно заменять операторы магнитных моментов атомов классическими векторами. Это позволяет использовать классические методы для описания магнитной динамики атомных цепочек. Для моделирования перемагничивания цепочек, состоящих из нескольких десятков или сотен атомов, может быть построена простая КММК модель, позволяющая вычислять время перемагничивания цепочки, строить кривые намагничивания и вычислять критическую температуру.

В результате анализа экспериментальных и теоретических данных было обнаружено, что остается еще много вопросов, требующих дальнейших тщательных исследований. К таким вопросам относятся самоорганизация кластеров Со и Fe на поверхности меди, диффузия атомов Со в приповерхностной области меди, формирование и свойства сплава Pt/Cu в первом слое поверхности меди, формирование дендритов Pt/Cu на поверхности меди, образование вакансий в поверхности меди при взаимодействии с СТМ иглой, электромиграция вакансионных кластеров в по-

верхности меди, образование муаровой структуры графена на поверхности меди, магнитные свойства ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек конечной длины на поверхности меди и других металлов. Для проведения дальнейших исследований необходимо, во-первых, разработать современный численный метод моделирования самоорганизации атомных систем на поверхности гцк металлов, во-вторых, развить новый аналитический метод вычисления магнитных свойств атомных цепочек конечной длины.

Во **второй главе** представлено описание методов теоретического исследования свойств наноструктур на поверхности металлов. Рассмотрены основы теории функционала плотности (ТФП), классической молекулярной динамики (МД) и кинетического метода Монте Карло (КММК). Кроме того, получен ряд новых результатов. Во-первых, в рамках приближения Росато-Жиллопа-Легранда найдены параметры межатомных потенциалов Pt-Pt и Pt-Cu. При поиске параметров потенциалов учитывались, как объемные свойства платины, взятые из экспериментальных данных, так и энергетические характеристики поверхностного сплава Pt/Cu, вычисленные в рамках теории функционала плотности. Найденные параметры потенциалов могут быть использованы для исследования свойств поверхностных сплавов Pt/Cu, а также близких к ним физических систем, таких как Pt/Cu нанокластеры, нанопровода и наноконтакты. Во-вторых, на основе КММК разработаны решеточные самообучающиеся алгоритмы, позволяющие моделировать диффузию атомов на поверхностях (001) и (111) гцк кристаллов. Данные алгоритмы позволяют решать широкий круг физических задач, связанных с поверхностной диффузией атомов и вакансий. Также разработан новый эффективный метод поиска границ потенциальных ям, необходимый для

ускорения самообучающегося алгоритма на поверхности (111) гцк кристаллов. В-третьих, на языке Fortran 90 написан комплекс программ, реализующий методы молекулярной статики, молекулярной динамики, метод упругой ленты, различные варианты решеточного КМК, а также методы поиска параметров межатомных потенциалов. Разработанный комплекс программ может быть использован для решения на атомном уровне широкого круга физических задач, связанных, в первую очередь, с механическими и кинетическими свойствами переходных металлов, их сплавов и наноструктур на их поверхности, а также с механическими свойствами графена на поверхностях переходных металлов.

В **третьей главе** рассматривается формирование и физические свойства различных наноструктур (нанокластеров кобальта и железа, однослойного графен, дендритов из атомов меди и платины) на поверхности монокристаллов Cu(001) и Cu(111).

При осаждении небольшого количества атомов Co ($D < 1$ МС) на поверхность Cu(001) в результате самоорганизации формируются двухслойные кластеры кобальта. Показано, что рост кластеров происходит в две стадии. На первой стадии происходит формирование компактных кластеров в первом слое, а число атомов во втором слое убывает. На второй стадии происходит формирование второго слоя кластера до тех пор, пока второй слой полностью не покроет первый. При этом переход от первой стадии роста ко второй существенно зависит от температуры: при $T = 300$ К он происходит за время порядка 10 с после окончания осаждения атомов Co, а при $T = 200$ К за характерное для эксперимента время не происходит вообще.

Деформация кластеров кобальта и поверхности Cu(001) вблизи кластеров приводит к появлению анизотропии диффузионных барьеров для

прыжков атомов Со. Обнаружено, что наибольшая анизотропия диффузионных барьеров наблюдается вблизи границ и углов кластеров. При увеличении размеров кластеров эта анизотропия возрастает, что при низких температурах может привести к появлению пустых зон как на самих кластерах, так и вблизи них. Для получения количественного согласия с экспериментальными данными при исследовании эволюции системы малых (порядка нескольких десятков атомов) кластеров зависимость значений диффузионных барьеров от размера кластера необходимо учитывать не только при низкой, но и при комнатной температуре.

Было показано, что погружение атомов Со или Fe в первый слой подложки Cu(001) при осаждении может существенно увеличить плотность размещения кластеров. Для того чтобы активировать процесс погружения атомов Со или Fe, температура подложки должна превышать 270 К для эпитаксиальной системы Со/Cu(001) и 220 К для системы Fe/Cu(001). При этом скорость осаждения атомов Со или Fe должна быть не слишком большой: меньше ~ 1 МС/с для системы Со/Cu(001) и меньше ~ 100 МС/с для системы Fe/Cu(001). При указанных условиях погружение атомов Со или Fe приводит к уменьшению среднего размера кластеров и увеличению относительного числа маленьких компактных кластеров, таких как 2×2 , 3×2 и 3×3 .

В связи с недостаточной точностью современных данных ТФП расчетов предложено использовать для поиска параметров потенциалов графен-медь свойства муаровой структуры графена на поверхности меди. В качестве примера рассмотрен потенциал Леннарда-Джонса. Найдена область параметров ϵ и σ потенциала Леннарда-Джонса, соответствующая современным данным ТФП расчетов энергии связи $E_{св}$ и расстояния d между графеном и поверхностью Cu(111). Показано,

что эта область может быть разделена на подобласти, соответствующие разному количеству устойчивых муаровых структур графена, отличающихся друг от друга углом поворота Θ относительно поверхности Cu(111). Обнаружено, что одна из этих подобластей соответствует углам Θ близким в экспериментально наблюдаемым $\Theta = 0^\circ, 7^\circ, 10.4^\circ$.

Показано, что средняя энергия связи $E_{\text{св}}$ графена с поверхностью Cu(111) слабо зависит от температуры в интервале температур ниже 800 К: изменение $E_{\text{св}}(T)$ лежит в пределах ~ 1 мэВ на атом углерода, что составляет примерно один процент от энергии связи графена с поверхностью. При этом обнаружено, что в том же интервале температур расстояние d между графеном и поверхностью меди линейно увеличивается с температурой. Предложена аналитическая модель, позволяющая связать коэффициент линейного теплового увеличения расстояния между графеном и поверхностью меди с параметрами ϵ и σ потенциала Леннарда-Джонса, использованного для моделирования взаимодействия графен-медь.

Для более корректного моделирования муаровой структуры графена на поверхности Cu(111) предложен модифицированный потенциал Морзе. Показано, что полученная с использованием этого потенциала муаровая структура (рис. 1) качественно согласуется с изображениями, полученными экспериментально с помощью сканирующего туннельного микроскопа, а толщина муаровой структуры и энергия связи графена с поверхностью меди в пределах погрешности совпадают с экспериментальными данными. Кроме того, модифицированный потенциал Морзе дает адекватные значения энергии связи и диффузионного барьера для атома меди на поверхности графена. При этом обнаружено, что в случае диффузии одиночного атома Cu вклад от разности колебательных

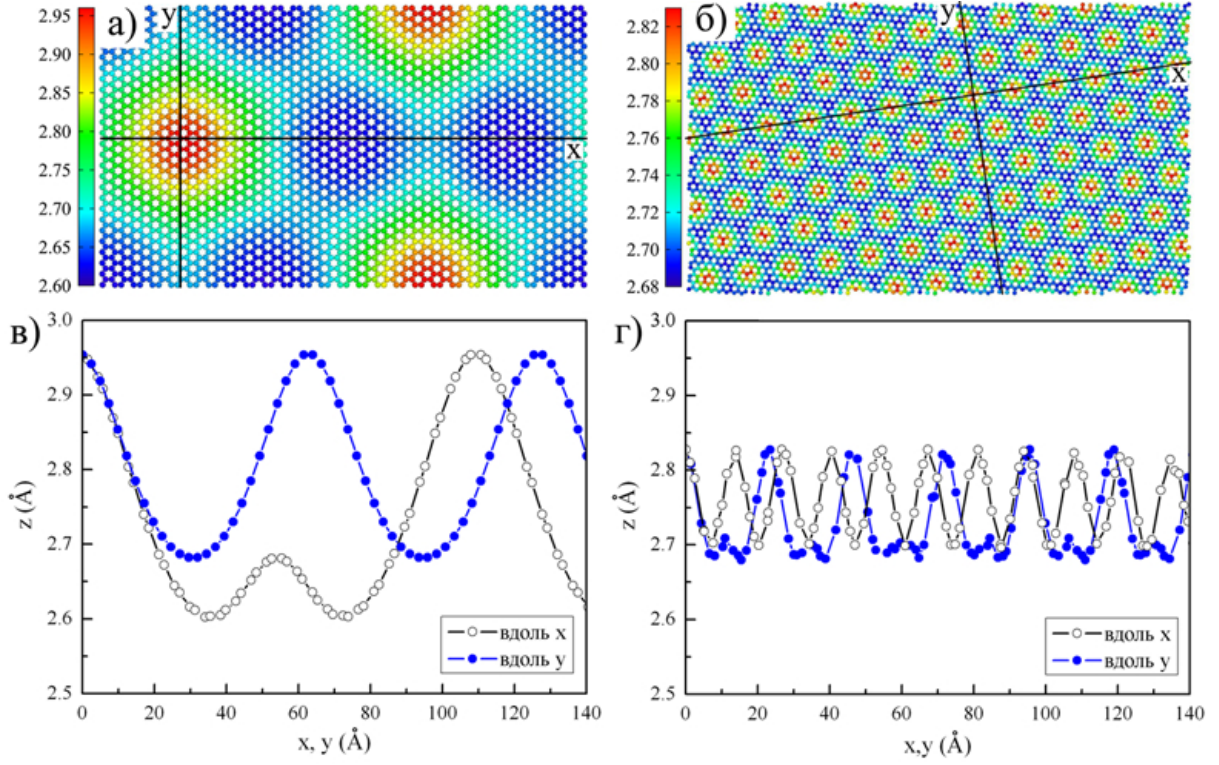


Рис. 1: Муаровые структуры графена на поверхности Cu(111), полученные с использованием модифицированного потенциала Морзе: (а,в) $\Theta = 0^\circ$, (б,д) $\Theta = 10.4^\circ$. Цвета на рисунках (а,б) обозначают расстояния в Å между графеном и поверхностью Cu(111) в соответствии с цветовой шкалой слева от рисунков. На рисунках (в,д) показаны профили графена вдоль линий, показанных на рисунках (а,б).

свободных энергий $\Delta f_{\text{кол}}$ оказывается одного порядка с диффузионным барьером E_D , поэтому ей нельзя пренебрегать при моделировании диффузии атомов меди по поверхности графена.

Установлено, что фрактальная размерность D_f смешанных Pt–Cu кластеров на поверхности Cu(111) логарифмически убывает с увеличением скорости осаждения атомов и монотонно возрастает с увеличением температуры подложки. А при изменении относительной концентрации платины $n_{\text{Pt}}/n_{\text{Cu}}$ обнаружены следующие два явления. Во-первых, происходит изменение симметрии кластеров от симметрии равностороннего шестиугольника к симметрии равностороннего треугольника. Это изме-

нение симметрии объяснено с помощью анализа диффузионных барьеров для прыжков атомов Pt и Cu вблизи углов кластеров. Во-вторых, обнаружена немонотонная зависимость фрактальной размерности D_f кластеров от относительной концентрации платины n_{Pt}/n_{Cu} . Показано, что эта зависимость может быть объяснена в рамках обобщенной модели диффузионно-лимитированного роста, если предположить, что эффективный диффузионный барьер $\Delta E_{кр}$ для прыжков атомов вдоль края кластера является кубическим полиномом от величины n_{Pt}/n_{Cu} .

Четвертая глава посвящена исследованию формирования и физических свойств различных наноструктур (связанных наноструктур из атомов Co и Fe, поверхностных сплавов Pt/Cu(001) и Pt/Cu(111), вакансионных кластеров) в приповерхностных слоях монокристаллов Cu(001) и Cu(111).

Показано, что формирование связанных наноструктур из атомов Co и Fe, погруженных в первый слой поверхности Cu(001), без покрытия их атомами Cu возможно при температурах 300–400 К. Основным механизмом диффузии погруженных атомов Co и Fe является вакансионный механизм. При этом диффузия димеров также играет существенную роль, особенно при температурах близких к 400 К, и должна учитываться в теоретических моделях для реалистичного моделирования формирования связанных наноструктур. Обнаружено, что в процессе самоорганизации связанных наноструктур система погруженных атомов Co или Fe проходит через три стадии эволюции: стадия диффузии адатомов, стадия формирования атомных цепочек и стадия формирования компактных кластеров. Причем в случае системы Fe/Cu(001) длительность второй стадии эволюции существенно меньше, чем для системы Co/Cu(001).

Найдены основные магнитные характеристики связанных нанострук-

тур формирующихся из атомов Co и Fe, погруженных в первый слой поверхности Cu(001): спиновые и орбитальные магнитные моменты атомов, энергии магнитной анизотропии (ЭМА) наноструктур. Обнаружено, что вследствие взаимодействия между адатомами компактные наноструктуры имеют меньшую ЭМА, чем некомпактные; средняя ЭМА для наноструктур из атомов Fe оказывается существенно меньше, чем ЭМА для аналогичных наноструктур из атомов Co; оси легкого намагничивания всех наноструктур из атомов Co лежат в плоскости поверхности Cu(001), а оси легкого намагничивания всех наноструктур (за исключением адатома) из атомов Fe перпендикулярны поверхности. Спиновый магнитный момент атомов Co примерно в полтора раза меньше, чем у атомов Fe, при этом спиновые моменты атомов в связанных наноструктурах оказываются несколько больше, чем у адатомов, а их анизотропия пренебрежимо мала. Орбитальные магнитные моменты атомов Fe и Co уменьшаются за счёт взаимодействия адатомов друг с другом, а их анизотропия достаточно велика.

Сопоставляя результаты о самоорганизации и магнитных свойствах наноструктур из атомов Fe и Co в первом слое поверхности Cu(001), была определена временная эволюция среднего по всем наноструктурам значения ЭМА поверхности меди. Обнаружено, что среднее значение ЭМА монослоя Co/Cu(001) монотонно убывает по абсолютной величине от 2.01 мэВ до 0.36 мэВ в расчете на один атом Co. В то же время, среднее значение ЭМА монослоя Fe/Cu(001) ведет себя более сложным образом. Во-первых, вследствие димеризации адатомов происходит поворот оси легкого намагничивания монослоя. Во-вторых, зависимость среднего значения ЭМА от времени оказывается немонотонной и имеет максимум, соответствующий переходу от стадии диффузии адатомов к

стадии формирования компактных кластеров.

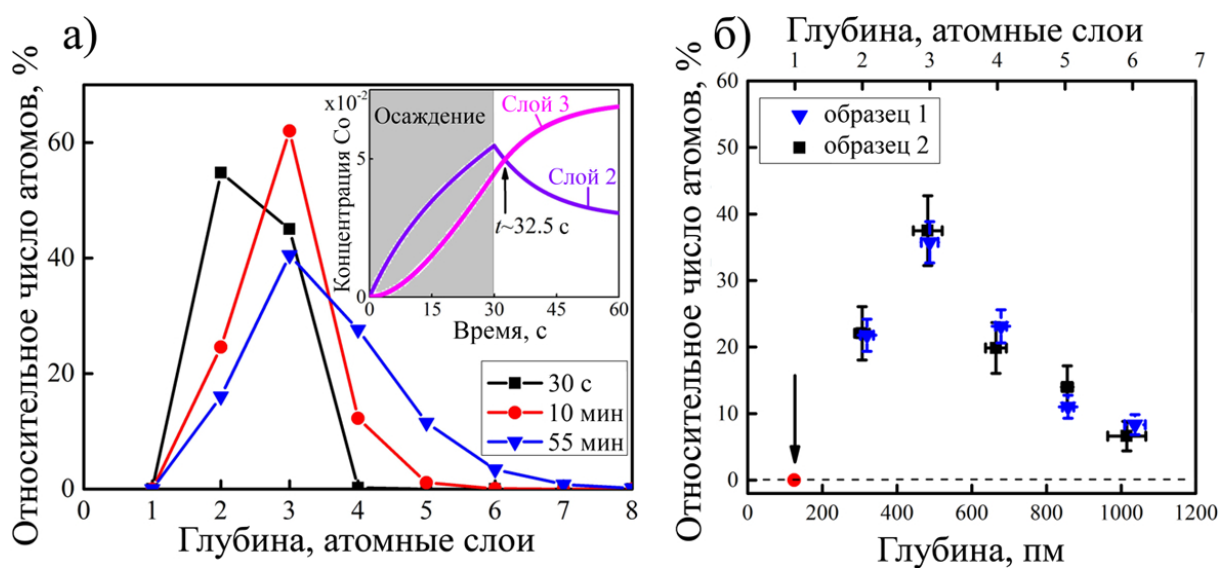


Рис. 2: Распределение атомов Co по глубине погружения в поверхность Cu(001) при температуре $T = 650$ К и скорости осаждения кобальта $F = 0.2$ МС/мин: (а) теоретические распределения в моменты времени $t = 30$ с, $t = 10$ мин и $t = 55$ мин; (б) экспериментальное распределение, полученное по результатам исследования двух образцов. На вставке на рис. (а) показаны теоретические зависимости концентраций атомов Co во втором и третьем слоях от времени.

Объяснен механизм диффузии атомов Co в приповерхностной области Cu(001) при температуре ниже 800 К. Показано, что основным механизмом диффузии атомов Co в приповерхностной области является вакансионный механизм. В результате тщательного анализа диффузионных барьеров и энергий формирования вакансий построена реалистичная диффузионная модель, результаты которой находятся в превосходном количественном согласии с экспериментальными данными, полученными при температуре 650 К (рис. 2).

При исследовании формирования поверхностного сплава Pt/Cu(111) в процессе осаждения платины на поверхность Cu(111) было обнаружено, что при скорости осаждения ниже 0.01 МС/с и температуре вы-

ше 285 К на ступенях поверхности Cu(111) формируются пальцеобразные выступы, насыщенные атомами Pt. Средняя длина пальцеобразных выступов увеличивается при увеличении концентрации Pt. На ступени Б растут более длинные пальцеобразные выступы, чем на ступени А. Атомы Pt расположены вблизи краев ступени преимущественно случайным образом, иногда образуя небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111) со структурой $p(2 \times 2)$ или $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30$. Атомов Pt, расположенных на расстоянии вторых ближайших соседей друг от друга, больше, чем атомов Pt, расположенных на расстоянии третьих ближайших соседей. Расположенные вблизи ступеней кластеры Pt-Cu формируются в результате отрыва пальцеобразных выступов от ступени и имеют такую же структуру. В результате анализа диффузионных барьеров все полученные результаты объяснены на микроскопическом уровне. Полученные результаты имеют хорошее качественное согласие с экспериментальными данными.

Обнаружен фазовый переход порядок-беспорядок в поверхностном сплаве Pt/Cu(001) при температуре 300-400 К. Установлено, что при концентрации Pt меньше 0.3 МС сплав имеет ближний порядок. В частности, при концентрации 0.25 МС атомы Pt локально упорядочены как в сплаве $c(2 \times 2)$. При увеличении концентрации Pt до 0.3–0.5 МС и температуре 350–400 К в сплаве Pt/Cu(001) появляется дальний порядок. При этом время релаксации поверхностного сплава экспоненциально зависит от концентрации атомов Pt. Время релаксации поверхностного сплава быстро растет с понижением температуры и при комнатной температуре превышает 10^5 с.

На микроскопическом уровне объяснен механизм растворения малых кластеров Pt в первом слое поверхности Cu(001). Растворяющийся кла-

стер можно условно разделить на три области: плотное ядро, рыхлая структура и неупорядоченная область. Обнаружено, что после первоначального расширения плотного ядра кластера Pt одновременно происходят два процесса: линейное уменьшение размеров плотного ядра и рыхлой структуры кластера Pt и броуновское движение атомов Pt в неупорядоченной области на периферии кластера Pt. Установлено, что время растворения кластера Pt экспоненциально зависит от его первоначального размера.

В результате анализа диффузионных барьеров для образования вакансий вблизи ступеней на поверхности Cu(001) установлено, что поверхностные вакансии могут образовываться как вблизи ровных участков ступени, так и вблизи выступов. Доминирование одного или другого механизма образования вакансий зависит от отношения средней длины гладких участков ступени к критической длине гладкой ступени. Показано, что на поверхности Cu(001) при температуре 300–400 К доминирует механизм образования вакансий вблизи выступов. При этом интенсивности образования вакансий на верхней части ступени на 4–5 порядков больше, чем на нижней.

Показано, что взаимодействие между поверхностью Cu(001) и СТМ иглой приводит к локальному увеличению интенсивности образования поверхностных вакансий. Максимальное увеличение интенсивности образования вакансий достигается при расстоянии 3.0 Å между поверхностью и СТМ иглой. При этом на верхней части ступени локальная интенсивность образования вакансий может быть увеличена на 3–4 порядка, а на нижней части ступени – на 1–2 порядка при температуре 300–400 К. Установлено, что интенсивность образования поверхностных вакансий существенно зависит как от направления, так и от скорости

сканирования. При температуре 400 К увеличение интенсивности образования вакансий на ступени максимально, когда сканирование производится параллельно ступени со скоростью близкой к 1000 нм/с.

При исследовании электромиграции малых вакансионных кластеров на поверхности Cu(001) обнаружена и объяснена на микроскопическом уровне осцилляционная зависимость скорости дрейфа вакансионных кластеров от их размера. Установлено, что природа этих осцилляций связана с различием в механизмах диффузии «быстрых» и «медленных» вакансионных кластеров. Энергия активации для диффузии «быстрых» вакансионных кластеров примерно на 0.2 эВ меньше, чем для «медленных». Показано, что для корректного моделирования электромиграции вакансионных кластеров при температуре 300–400 К необходимо учитывать события, связанные с диффузией димеров.

Выяснено влияние точечных дефектов в первом слое поверхности Cu(001) на относительную скорость дрейфа вакансионных кластеров при электромиграции. Установлено, что вид зависимости скорости дрейфа вакансионных кластеров от концентрации примеси существенно зависит от того, формируются ли из атомов примеси компактные кластеры или нет. Если из атомов примеси (например, Co или Fe) формируются компактные кластеры, положение и форма которых не меняются при электромиграции, то относительная скорость дрейфа вакансионных кластеров существенно зависит от их размера. Если же атомы примеси (например, Pt) не образуют связанные кластеры и могут легко перемещаться в первом слое поверхности Cu(001), то относительная скорость дрейфа вакансионных кластеров не зависит от их размера. Кроме того, показано, что электромиграция вакансий не влияет на процесс самоорганизации связанных наноструктур из атомов Co и Fe в первом слое поверхности

Cu(001).

В **пятой главе** рассматривается вопрос о магнитных свойствах ферромагнитных и антиферромагнитных одинарных и двойных атомных цепочек конечной длины на поверхности металла.

При исследовании магнитных свойств одномерных цепочек Co-Au конечной длины на поверхности Cu(110) обнаружен фазовый переход в ферромагнитное состояние при низких температурах $T_{кр} < 25$ К. Показано, что критическая температура убывает с увеличением длины цепочки, однако, вследствие наличия магнитной анизотропии, остается конечной даже в пределе бесконечно длинной цепочки. Для того, чтобы цепочки Co-Au могли быть использованы для долгосрочного хранения информации, их температуру необходимо понизить до ~ 5 К. Исследования зависимости коэрцитивной силы цепочек Co-Au различной длины от температуры и скорости перемагничивания показали, что одномерные цепочки Co-Au обладают интересными магнитодинамическими свойствами, что делает их перспективными объектами для использования в низкотемпературных магнитных датчиках и наноэлектронике.

Обнаружен фазовый переход одномерных цепочек Mn-Au конечной длины на поверхности меди в антиферромагнитное состояние при низких температурах. Показано, что критическая температура убывает с увеличением длины цепочки, и практически не зависит от величины энергии магнитной анизотропии, если она лежит в интервале от 1 мэВ до 10 мэВ. При этом кристаллическая ориентация поверхности меди существенно влияет на величину обменного интеграла между соседними атомами Mn и, как следствие, на величину критической температуры цепочек Mn-Au. Так критическая температура цепочки Mn-Au, содержащей 100 атомов Mn, на поверхности Cu(110) составляет 40 ± 1 К, а на поверхности

Cu(111) – вдвое меньшую величину 19 ± 1 К.

В рамках приближения диффузии одной доменной стенки предложен новый аналитический метод, позволяющий в рамках модели Гейзенберга при наличии одноосной магнитной анизотропии вычислять время спонтанного перемагничивания и строить кривые намагничивания атомных ферромагнитных цепочек конечной длины при низкой температуре. Установлены пределы применимости метода. Показано, что предложенный метод дает результаты хорошо согласующиеся с результатами моделирования с помощью кинетического метода Монте-Карло (КММК). Кроме того, полученные в рамках этой модели формулы могут быть также использованы для определения ограничения снизу на температуру фазового перехода в парамагнитной состоянии.

Аналитический метод вычисления времени спонтанного перемагничивания атомных цепочек обобщен на случай антиферромагнитных цепочек. Предложена простая модель взаимодействия антиферромагнитной цепочки с иглой сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). В рамках предложенной модели найдены формулы, позволяющие аналитически вычислять среднее время перемагничивания антиферромагнитных цепочек при их взаимодействии с СТМ иглой. Показано, что предложенный метод вычисления времен перемагничивания антиферромагнитных цепочек дает результаты находящиеся в превосходном количественном согласии с результатами КММК моделирования.

Показано, как можно обобщить аналитический метод вычисления времени спонтанного перемагничивания атомных ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек на случай, когда обменный интеграл J' и энергия магнитной анизотропии K' для крайних атомов отличаются от параметров J и K для атомов, находящихся в середине цепочки. Уста-

новлено, что в случае, когда J в несколько раз превышает K краевыми эффектами для энергии магнитной анизотропии можно пренебречь, даже в том случае, когда $|K' - K| \sim K$. В то же время, краевые эффекты для обменного интеграла оказываются существенными и должны быть учтены уже при $|J' - J| \sim 0.1J$.

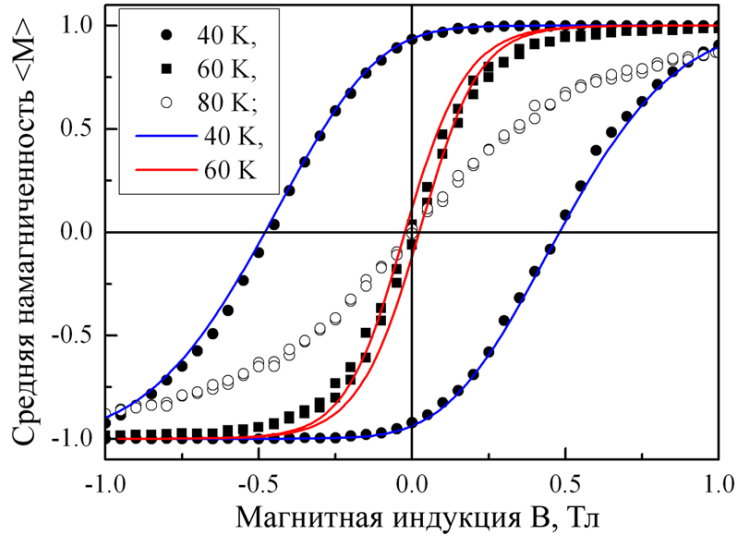


Рис. 3: Кривые намагничивания двойной атомной цепочки, содержащей 200 атомов, при различных температурах: 40 К, 60 К, и 80 К. Параметры гамильтониана Гейзенберга соответствуют системе Co/Pt(997). Точками обозначены значения намагниченности M , полученные в результате КМК моделирования и усредненные по 1000 циклам перемагничивания. Сплошными линиями показаны результаты аналитической модели.

Метод вычисления времени перемагничивания одинарных атомных ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек обобщен на случай двойных атомных цепочек. Рассмотрены два типа двойных атомных цепочек. Рассмотрены два приближения: слабой и сильной связи между атомными цепочками. Найдены пределы применимости этих приближений. Найдены аналитические формулы для вычисления среднего времени перемагничивания двойных атомных ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек как при их спонтанном перемагничивании, так и

при перемагничивании в результате взаимодействия с СТМ иглой. В рамках приближения сильной связи между атомными цепочками предложен быстрый способ численного вычисления кривых намагничивания двойных ферромагнитных атомных цепочек. Показано, что в рамках пределов своей применимости предложенные методы дают результаты превосходно согласующиеся с результатами КМК моделирования (рис. 3), позволяя многократно сократить вычислительное время.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. На основе кинетического метода Монте-Карло разработаны решеточные самообучающиеся алгоритмы, позволяющие моделировать диффузию атомов на поверхностях (001) и (111) гцк кристаллов. На языке Fortran 90 написан комплекс программ, реализующий методы молекулярной статистики, молекулярной динамики, метод упругой ленты, различные варианты решеточного кинетического метода Монте-Карло, а также методы поиска параметров межатомных потенциалов.
2. Предложен аналитический метод, позволяющий в рамках модели Гейзенберга при наличии одноосной магнитной анизотропии вычислять время спонтанного и вынужденного перемагничивания одинарных и двойных атомных ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек конечной длины при низкой температуре. Предложен быстрый способ численного вычисления кривых намагничивания ферромагнитных атомных цепочек. Предложена модель взаимодействия антиферромагнитной цепочки с иглой сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Показано, что предложенный метод дает результаты, хорошо согласующиеся с результатами модели-

рования с помощью кинетического метода Монте-Карло (КММК), позволяя многократно сократить вычислительное время.

3. При осаждении небольшого количества атомов Со на поверхность Cu(001) при температуре 200–300 К формируются двухслойные кластеры кобальта. Рост кластеров происходит в две стадии: сначала происходит формирование компактных кластеров в первом слое, а число атомов во втором слое убывает, затем происходит формирование второго слоя кластера до тех пор, пока второй слой полностью не покроет первый. Погружение атомов Со или Fe в первый слой подложки Cu(001) при осаждении может существенно увеличить плотность размещения кластеров. При температурах 300–400 К происходит формирование связанных наноструктур из атомов Со и Fe, погруженных в первый слой поверхности Cu(001). Основным механизмом диффузии погруженных атомов Со и Fe является вакансионный механизм. В процессе самоорганизации связанных наноструктур система погруженных атомов Со или Fe проходит через три стадии эволюции: стадия диффузии адатомов, стадия формирования атомных цепочек и стадия формирования компактных кластеров. Обнаружено, что среднее значение ЭМА монослоя Со/Cu(001) монотонно убывает по абсолютной величине, а зависимость среднего значения ЭМА монослоя Fe/Cu(001) от времени оказывается немонотонной и имеет максимум, соответствующий переходу от стадии диффузии адатомов к стадии формирования компактных кластеров.
4. В процессе формирования поверхностного сплава Pt/Cu(111) при осаждении платины на поверхность Cu(111) при температуре выше 285 К на ступенях поверхности Cu(111) формируются пальцеоб-

разные выступы, насыщенные атомами Pt, причем средняя длина пальцеобразных выступов увеличивается при увеличении концентрации Pt. Атомы Pt расположены вблизи краев ступени преимущественно случайным образом, иногда образуя небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111) со структурой $p(2 \times 2)$ или $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30$. Обнаружен фазовый переход порядок-беспорядок в поверхностном сплаве Pt/Cu(001) при температуре 300-400 К. При этом время релаксации поверхностного сплава экспоненциально зависит от концентрации атомов Pt. На микроскопическом уровне объяснен механизм растворения малых кластеров Pt в первом слое поверхности Cu(001). Установлено, что время растворения кластера Pt экспоненциально зависит от его начального размера.

5. На поверхности Cu(111) при комнатной температуре могут формироваться два типа кластеров из атомов Pt и Cu. Компактные кластеры Pt-Cu, расположенные вблизи атомных ступеней, формируются в результате отрыва пальцеобразных выступов от ступени и имеют такую же структуру. Вдали от атомных ступеней формируются плоские дендриты из атомов Pt и Cu, фрактальная размерность которых логарифмически убывает с увеличением скорости осаждения атомов и монотонно возрастает с увеличением температуры подложки. При изменении относительной концентрации платины n_{Pt}/n_{Cu} происходит изменение симметрии кластеров. Обнаружена немонотонная зависимость фрактальной размерности кластеров от относительной концентрации платины n_{Pt}/n_{Cu} . Эта зависимость может быть объяснена в рамках обобщенной модели диффузионно-лимитированного роста.

6. Предложено использовать для поиска параметров потенциала

графен-медь свойства муаровой структуры графена на поверхности меди. Найдена область параметров ϵ и σ потенциала Леннарда-Джонса, соответствующая современным данным. Обнаружено, что при температуре ниже 800 К расстояние между графеном и поверхностью меди линейно увеличивается с температурой. Для корректного моделирования муаровой структуры графена на поверхности Cu(111) предложен новый потенциал взаимодействия графен-медь. Полученная с использованием нового потенциала муаровая структура графена качественно согласуется с СТМ изображениями, а толщина муаровой структуры и энергия связи графена с поверхностью меди в пределах погрешности совпадают с экспериментальными данными. Новый потенциал дает адекватные значения энергии связи и диффузионного барьера для атома меди на поверхности графена.

7. Обнаружена и объяснена на микроскопическом уровне осцилляционная зависимость скорости электромиграции малых вакансионных кластеров на поверхности Cu(001) от их размера. Природа этих осцилляций связана с различием в механизмах диффузии «быстрых» и «медленных» вакансионных кластеров. Выяснено влияние точечных дефектов в первом слое поверхности Cu(001) на относительную скорость дрейфа вакансионных кластеров при электромиграции. Если из атомов примеси формируются компактные кластеры, то относительная скорость дрейфа вакансионных кластеров существенно зависит от их размера. Если же атомы примеси не образуют связанные кластеры, то относительная скорость дрейфа вакансионных кластеров не зависит от их размера. Показано, что электромиграция вакансий не влияет на процесс самоорганизации

связанных наноструктур из атомов Co и Fe в первом слое поверхности Cu(001).

8. На микроскопическом уровне объяснен механизм диффузии атомов Co в приповерхностной области Cu(001) при температуре ниже 800 К. Показано, что основным механизмом диффузии атомов Co в приповерхностной области является вакансионный механизм. Построена реалистичная диффузионная модель, результаты которой находятся в превосходном количественном согласии с экспериментальными данными, полученными при температуре 650 К.
9. Установлено, что вакансии на поверхности Cu(001) образуются преимущественно вблизи атомных ступеней: как вблизи ровных участков ступени, так и вблизи выступов. Обнаружено, что взаимодействие между поверхностью Cu(001) и СТМ иглой приводит к локальному увеличению интенсивности образования поверхностных вакансий. Максимальное увеличение интенсивности образования вакансий достигается при расстоянии 3.0 \AA между поверхностью и СТМ иглой. Установлено, что интенсивность образования поверхностных вакансий зависит как от направления, так и от скорости сканирования.
10. Обнаружен фазовый переход в ферромагнитное состояние одномерных цепочек Co-Au конечной длины на поверхности Cu(110) при низких температурах $T_{\text{кр}} < 25 \text{ К}$. Обнаружен фазовый переход в антиферромагнитное состояние одномерных цепочек Mn-Au конечной длины на поверхности меди при низких температурах. Установлено, что взаимодействие ферромагнитной атомной цепочки с внешним магнитным полем и взаимодействие антиферромаг-

нитной цепочки с СТМ иглой приводят к уменьшению времени перемагничивания на несколько порядков. Показано, что краевые эффекты для обменного интеграла оказываются существенными и должны учитываться при исследовании магнитных свойств.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и SCOPUS

1. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, A. M. Saletsky. Atomic-scale self-organization of Co nanostructures embedded into Cu(100). *Physical Review B* **79**, 115433 (2009). IF=3.575 (Вклад автора 0.7).
2. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, A. M. Saletsky. Vacancy formation on stepped Cu(100) accelerated with STM: Molecular dynamics and kinetic Monte Carlo simulations. *Physical Review B* **80**, 245412 (2009). IF=3.575 (Вклад автора 0.7).
3. С. В. Колесников, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий. Моделирование процесса образования вакансий при сканировании поверхности Cu(100). *Письма в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"* **89**, 560–563 (2009). IF=1.399 (Вклад автора 0.7).
4. С. В. Колесников, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий. Формирование двухслойных островов Co на поверхности Cu(100). *Физика твердого тела* **51**, 1183–1187 (2009). IF=0.931 (Вклад автора 0.7).
5. С. В. Колесников, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий. Анизотропия энергетических барьеров для диффузии адатома Co вблизи островов Co на поверхности Cu(100). *Физика твердого тела* **53**, 2379–2382 (2011). IF=0.931 (Вклад автора 0.7).

6. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, A. M. Saletsky. Strain relief and Pd island shape evolution on the palladium and palladium hydride (100) surface. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* **141**, 1137–1143 (2012). IF=1.152 (Вклад автора 0.7).
7. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, A. M. Saletsky. Self-organisation and magnetic properties of Co nanostructures embedded in a Cu(100) surface. *Surface Science* **612**, 48–56 (2013). IF=1.717 (Вклад автора 0.5).
8. S.V. Kolesnikov, A.L. Klavsyuk, A.M. Saletsky. The role of the diffusion of dimers in the formation of Co nanostructures embedded into Cu(100) surface. *The European Physical Journal B* **86**, 399 (2013). IF=1.347 (Вклад автора 0.8).
9. С. А. Докукин, О. В. Дроздов, С. В. Колесников, А. М. Салецкий. Влияние процессов погружения атомов на плотность размещения нанокластеров Fe и Co на поверхности Cu(100). *Физика твердого тела* **55**, 1403–1407 (2013). IF=0.931 (Вклад автора 0.7).
10. С. В. Колесников. Самоорганизация наноструктур из атомов железа в первом слое поверхности меди (100). *Письма в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"* **99**, 329–332 (2014). IF=1.399 (Вклад автора 1.0).
11. К. М. Tsysar, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky. Magnetization dynamics of mixed Co–Au chains on Cu(110) substrate: Combined ab initio and kinetic Monte Carlo study. *Chinese Physics B* **24**, 097302 (2015). IF=1.223 (Вклад автора 0.5).
12. С. В. Колесников, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий. Магнитные свой-

- ства одномерных цепочек Au-Co на поверхности меди (110). *Физика твердого тела* **57**, 1492–1497 (2015). IF=0.931 (Вклад автора 0.7).
13. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, A. M. Saletsky. Fe and Co nanostructures embedded into Cu(100) surface: self-organization and magnetic properties. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* **148**, 706–713 (2015). IF=1.152 (Вклад автора 0.7).
 14. T. Siahaan, O. Kurnosikov, H. J. M. Swagten, B. Koopmans, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk. Co diffusion in the near-surface region of Cu. *Physical Review B* **94**, 195435 (2016). IF=3.575 (Вклад автора 0.5).
 15. A.V. Sidorenkov, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky. Molecular dynamics simulation of graphene on Cu(111) with different Lennard-Jones parameters. *The European Physical Journal B* **89**, 220 (2016). IF=1.347 (Вклад автора 0.7).
 16. С. В. Колесников. Исследование магнитных свойств атомных цепочек конечной длины при низких температурах. *Письма в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"* **103**, 668–672 (2016). IF=1.399 (Вклад автора 1.0).
 17. K. M. Tsysar, S. V. Kolesnikov, I. I. Sitnikov, A. M. Saletsky. Ab initio investigation of supported Au-Mn nanowires. *Modern Physics Letters B* **31**, 1750142 (2017). IF=1.224 (Вклад автора 0.5).
 18. A. V. Sidorenkov, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky. Graphene on Cu(111) at the nonzero temperatures: Molecular dynamic simulation. *Modern Physics Letters B* **31**, 1750289 (2017). IF=1.224 (Вклад автора 0.7).

19. С. В. Колесников, И. Н. Колесникова. Оценка времени перемагничивания антиферромагнитных цепочек в рамках модели Гейзенберга. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* **152**, 759–766 (2017). IF=1.152 (Вклад автора 0.9).
20. S.A. Dokukin, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky, A.L. Klavsyuk. Growth of the Pt/Cu(111) surface alloy: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations. *Journal of Alloys and Compounds* **763**, 719–727 (2018). IF=4.65 (Вклад автора 0.5).
21. S.A. Dokukin, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky. Efficient energy basin finding method for atomistic kinetic Monte Carlo models. *Computational Materials Science* **155**, 209–215 (2018). IF=2.863 (Вклад автора 0.5).
22. С. В. Колесников, А. М. Салецкий, С. А. Докукин, А. Л. Клавсюк. Кинетический метод Монте-Карло: математические основы и приложения к физике низкоразмерных наноструктур. *Математическое моделирование* **30**, 48–80 (2018). IF=0.988 (Вклад автора 0.8).
23. С. В. Колесников, А. М. Салецкий. Электромиграция малых вакансионных кластеров на поверхности меди (100). *Письма в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"* **108**, 19–23 (2018). IF=1.399 (Вклад автора 0.9).
24. S. V. Kolesnikov, I. N. Kolesnikova. Magnetic properties of the finite-length biatomic chains in the framework of the single domain-wall approximation. *Physical Review B* **100**, 224424 (2019). IF=3.575 (Вклад автора 0.9).

25. S. V. Kolesnikov, I. N. Kolesnikova. Magnetization reversal time for ferromagnetic and antiferromagnetic chains in the Heisenberg model. *IEEE Magnetics Letters* **10**, 2509105 (2019). IF=1.539 (Вклад автора 0.9).
26. S.A. Dokukin, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky. Dendritic growth of the Pt-Cu islands on Cu(111) surface: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations. *Surface Science* **689**, 121464 (2019). IF=1.717 (Вклад автора 0.5).
27. S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky. Kinetic Monte Carlo simulation of small vacancy clusters electromigration on clean and defective Cu(100) surface. *The European Physical Journal B* **92**, 14 (2019). IF=1.347 (Вклад автора 0.9).
28. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий. Диффузия димеров атомов при формировании поверхностного сплава Pt/Cu(111). *Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия* № 4, 46–51 (2019). IF=0.538 (Вклад автора 0.5).
29. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk. Semiempirical potentials for Pt/Cu(100) surface alloy investigation. *AIP Conference Proceedings* **2064**, 030003 (2019). IF=0.6 (Вклад автора 0.5).
30. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky. Molecular dynamics simulation of the formation of Cu–Pt nanocontacts in the mechanically controlled break junction experiments. *Physical Chemistry Chemical Physics* **22**, 16136–16142 (2020). IF=3.735 (Вклад автора 0.5).
31. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk.

- Diffusion-mediated processes in Pt/Cu(001) surface alloy. *Surface Science* **692**, 121515 (2020). IF=1.717 (Вклад автора 0.7).
32. С. В. Колесников, А. В. Сидоренков, А. М. Салецкий. Моделирование взаимодействия графена с поверхностью меди с помощью модифицированного потенциала Морзе. *Письма в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"* **111**, 101–106 (2020). IF=1.399 (Вклад автора 0.8).
33. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий. Моделирование растяжения медно-платиновых наноконтактов методом молекулярной динамики. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* **158**, 858–865 (2020). IF=1.152 (Вклад автора 0.5).
34. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, A. M. Saletsky. Formation of embedded Co nanostructures in Cu(001) surface under electromigration. *Modern Physics Letters B* **35**, 2150090 (2021). IF=1.224 (Вклад автора 0.9).
35. А. Г. Сыромятников, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк. Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов. *Успехи физических наук* **191**, 705 (2021). IF=3.361 (Вклад автора 0.5).
36. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky. Formation of Cu-Pt nanocontacts in STM breaking junction simulations: MD simulations and one-dimensional diffusion model. *The European Physical Journal B* **94**, 85 (2021). IF=1.347 (Вклад автора 0.5).