

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКОНТАКТОВ Pt-Cu ПРИ ПОГРУЖЕНИИ ИГЛЫ СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА В ПОВЕРХНОСТНЫЙ СПЛАВ Pt-Cu МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

C. A. Докукин^{a,b}, C. B. Колесников^a, A. M. Салецкий^a*

^a Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия

^b Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук
119017, Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 марта 2021 г.,
после переработки 30 апреля 2021 г.
Принята к публикации 3 мая 2021 г.

Методом молекуллярной динамики исследовано формирование наноконтактов при погружении иглы сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) в поверхностный сплав Pt/Cu. Установлено, что атомы Pt движутся в наноконтакте меди посредством прыжков по атомным слоям в направлении от поверхности меди к основанию СТМ-иглы, в то время как атомы Cu движутся в противоположном направлении. Исследовано формирование наноконтактов при различной ориентации СТМ-иглы, температуре от 300 К до 800 К и разном количестве атомов Pt непосредственно под СТМ-иглой. Показано, что вероятность формирования смешанного Pt–Cu наноконтакта может достигать 50 %.

DOI: 10.31857/S0044451021090091

1. ВВЕДЕНИЕ

Металлические наноконтакты обладают рядом необычных физических и химических свойств [1, 2], что стимулирует их интенсивное экспериментальное и теоретическое исследование [2–6]. Обычно наноконтакты получаются с помощью одного из следующих трех методов: механически управляемого разрыва тонкого провода [7], выжигания отверстий в тонкой пленке с помощью просвечивающего электронного микроскопа [8] и погружения иглы сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) в металлическую подложку [9]. Последний способ удобен тем, что с его помощью возможно непосредственное измерение тока через наноконтакт и точный выбор участка подложки. Однако при этом в ходе эксперимента возникают трудности с определением атомной структуры формирующихся наноконтактов. Поэтому для того, чтобы исследовать механические деформации СТМ-иглы и подложки, различать ато-

мы в случае формирования смешанного наноконтакта из нескольких типов атомов и выяснить механизмы формирования наноконтактов на атомном уровне, обычно используется компьютерное моделирование погружения СТМ-иглы в подложку. Например, моделирование методом молекуллярной динамики (МД) влияния примесей на погружение платиновой СТМ-иглы в подложку Pt(001) показало, что погружение иглы приводит к выталкиванию атомов примеси из области взаимодействия [10]. При моделировании погружения никелевой СТМ-иглы в золотую подложку было обнаружено формирование наноконтакта, состоящего из атомов золота [11], причем в процессе моделирования структура наноконтакта проходит через последовательность состояний с различной степенью упорядоченности кристаллической решетки [12]. При погружении никелевой СТМ-иглы в медную подложку было обнаружено формирование наноконтакта, состоящего из атомов меди [13], а возникающие при этом механические напряжения приводят к появлению в подложке дислокаций Шокли и Франка [14].

* E-mail: dokukin.sergey@physics.msu.ru

Интерес к Pt/Cu-наноконтактам связан, в первую очередь, с их необычными структурными свойствами [5]. Наноконтакт Pt/Cu имеет сложную структуру, представляющую собой совокупность исходной ГЦК-структуры меди, структуры, состоящей из двух центрированных икосаэдров, и пентагональной структуры [6]. Столь необычные структурные свойства могут приводить к интересным электронным, магнитным и термоэлектронным свойствам Pt/Cu-наноконтактов, в частности, к возникновению спинового эффекта Зеебека [15].

В данной работе представлены результаты исследования процессов погружения медной СТМ-иглы в поверхностный сплав, состоящий из атомов меди и платины, и последующее вытягивание СТМ-иглы из этого поверхностного сплава. Как показано в работах [16, 17], в сплавах меди и платины при небольших концентрациях платины и температуре 315 К в первом слое поверхности Cu(111) формируются небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111) со структурой $p(2 \times 2)$ или $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ ¹⁾. При этом атомы меди и платины испытывают сильное взаимное притяжение [5, 6, 17–19]. В результате при вытягивании СТМ-иглы атомы платины может перейти из подложки в область контакта, что приводит к формированию смешанных медно-платиновых наноконтактов. Для полного описания процессов формирования наноконтактов необходимо ответить на следующие вопросы. Какова вероятность формирования смешанного наноконтакта при вытягивании СТМ-иглы? Каков механизм диффузии атомов Pt в медном контакте? Какова структура подложки после извлечения из нее СТМ-иглы? Все эти вопросы рассмотрены в данной статье.

2. МЕТОД

Для исследования взаимодействия СТМ-иглы с подложкой был использован разработанный авторами программный код [5], в основе которого лежит алгоритм классической молекулярной динамики с цепочкой термостатов Нозе–Гувера [20, 21]. Данный программный код ранее был использован для моделирования растяжения медно-платиновых нанокон-

¹⁾ Далее мы будем рассматривать только небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111), содержащие не более 7 атомов Pt. Поскольку взаимодействие поверхности с СТМ-иглой локально, мы будем пренебречь наличием в поверхности других атомов Pt. Очевидно, что это можно сделать при небольших концентрациях платины в поверхности меди.

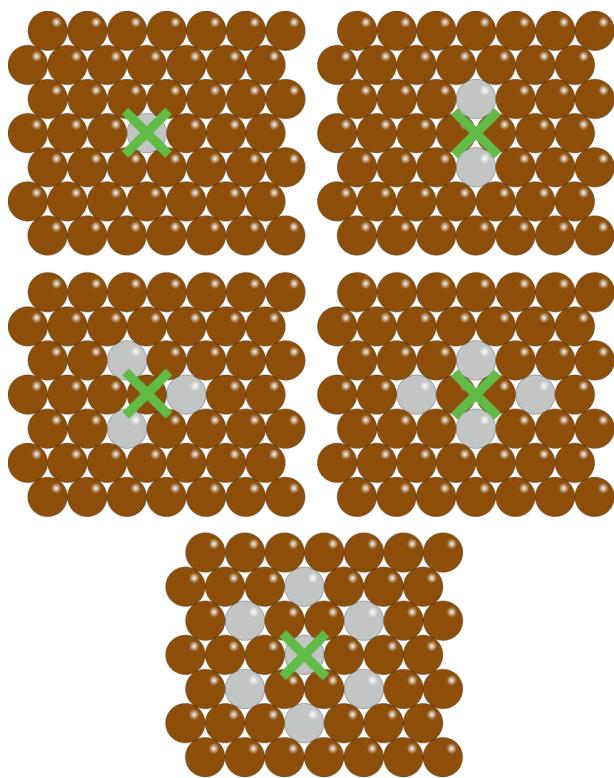


Рис. 1. Верхний слой подложки с участком поверхностного сплава Cu(111) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pt с различным числом атомов платины в подложке (вид сверху). Атомы меди обозначены коричневым цветом, атомы платины — серым. Зеленый крест — проекция вершины СТМ-иглы на поверхность Cu(111)

тактов, получаемых методом механически управляемого разрыва [5, 6]. Мы предполагаем, что скорость погружения и вытягивания СТМ-иглы одинакова и равна 0.1 м/с. Несмотря на то, что скорость движения СТМ-иглы на несколько порядков больше экспериментальной, обычно такой метод моделирования взаимодействия СТМ-иглы с подложкой приводит к получению результатов, согласующихся с экспериментальными [11, 22, 23].

Вычисления проводились для подложки, состоящей из 7 слоев Cu(111) по 224 атома в слое. Положения атомов в двух нижних слоях фиксированы, а в плоскости поверхности подложки наложены периодические граничные условия. В верхнем слое находится небольшой участок медно-платинового сплава²⁾ Cu(111) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pt

²⁾ Мы рассматривали различные медно-платиновые сплавы в подложках Cu(001) и Cu(111). Однако было обнаружено, что вероятность вытягивания атомов платины из сплава Cu(111) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pt существенно выше, чем в других случаях, поэтому далее мы будем рассматривать только этот поверхностный сплав.

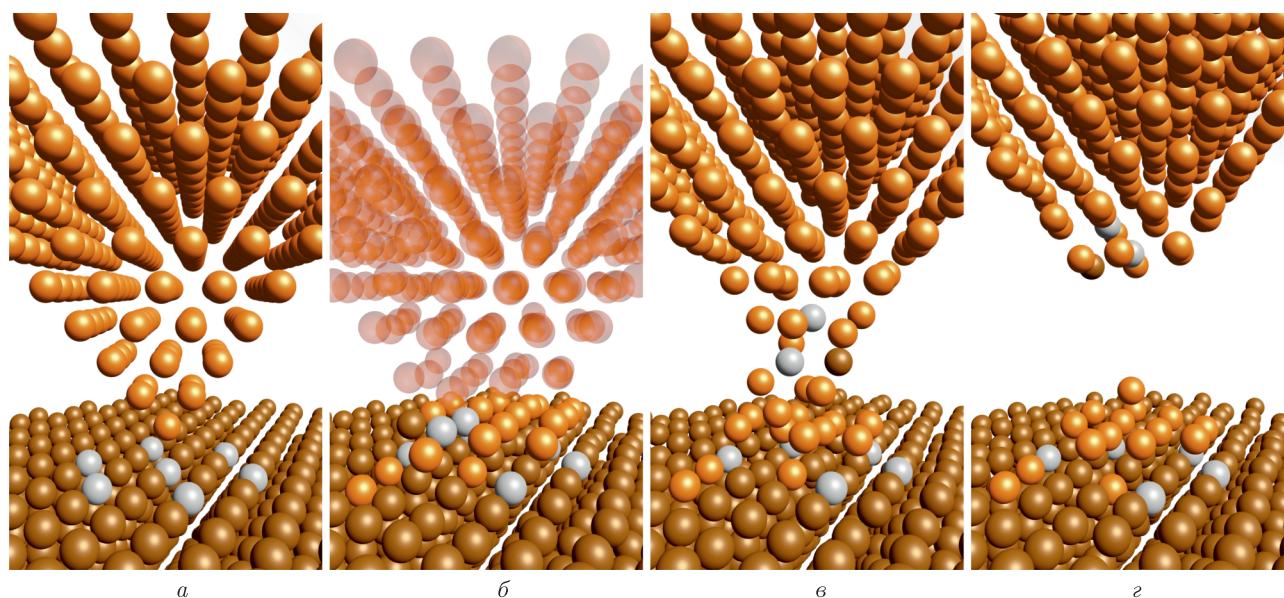


Рис. 2. Расположение атомов в вычислительной ячейке при погружении СТМ-иглы с ориентацией (001) в участок сплава Cu(111) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pt с 7 атомами платины в различные моменты времени: *а* — начальное положение атомов в вычислительной ячейке, *б* — формирование контактного пятна, переход от погружения к вытягиванию СТМ-иглы, *в* — формирование медно-платинового наноконтакта, *г* — разрыв наноконтакта и окончание моделирования. Коричневым и оранжевым цветом показаны атомы меди соответственно из подложки Cu(111) и СТМ-иглы. Серым цветом — атомы платины. На рис. *б* — часть атомов изображена прозрачными шариками для лучшего изображения контактного пятна

(рис. 1). СТМ-игла имеет вид пирамиды, вырезанной из ГЦК-кристалла меди. Под ориентацией СТМ-иглы мы далее будем понимать ориентацию верхней поверхности пирамиды. СТМ-игла состоит из 385, 285 и 363 атомов меди в случае ориентации соответственно (001), (110) и (111). Относительные положения атомов в двух верхних слоях СТМ-иглы фиксированы; погружение и вытягивание СТМ-иглы осуществляется за счет перемещения этих слоев как единого целого. Вершина СТМ-иглы изначально располагается непосредственно над участком поверхности сплава Cu(111) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pt, как это показано на рис. 1.

Напряжение смещения между поверхностью и СТМ-иглой может оказывать существенное влияние на формирование наноконтактов. По существу, влияние электрического тока, текущего через наноконтакт, сводится, во-первых, к его нагреванию, во-вторых, к электромиграции атомов наноконтакта [24]. Однако для того, чтобы активировать эти процессы, напряжение смещения должно превышать 0.4–0.6 В [24]. В то же время, типичное напряжение смещения, при котором происходит сканирование поверхности сплава Pt/Cu(111), составляет

0.01–0.05 В [16]. При таких напряжениях смещения влиянием электрического тока на формирование наноконтакта можно пренебречь. Поэтому далее мы рассматриваем формирование наноконтактов при нулевом напряжении смещения. При этом тот факт, что погружается именно СТМ-игла, становится неважным, и все полученные ниже результаты в равной степени верны и для погружения, например, иглы атомно-силового микроскопа.

Начальное положение атомов в вычислительной ячейке в случае ориентации СТМ-иглы (001) показано на рис. 2*а*. Процесс моделирования состоит из следующих двух этапов: 1) погружение СТМ-иглы до формирования контактного пятна радиусом 7 Å (рис. 2*б*) и 2) вытягивание СТМ-иглы вплоть до момента разрыва наноконтакта (рис. 2*г*). При вытягивании СТМ-иглы из подложки формируются медно-платиновые наноконтакты, структура которых аналогична структуре наноконтактов, формирующихся в процессе механически управляемого разрыва [5, 6] при небольших концентрациях атомов платины.

Межатомные взаимодействия описывались потенциалами, полученными в приближении сильной связи [25, 26]. Величина потенциальной энергии взаимодействия E_{coh} описывается двумя слагающими

мыми. Первое слагаемое E_b^i соответствует притяжению атомов и содержит многочастичные взаимодействия. Второе слагаемое E_r^i соответствует отталкиванию атомов и представлено в форме модифицированного потенциала Борна–Майера [27]

$$E_{coh} = \sum_i (E_b^i + E_r^i), \quad (1)$$

$$E_b^i = - \left\{ \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[-2q_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] \times \right. \\ \left. \times f_c(r_{ij}) \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

$$E_r^i = \sum_j \left[A_{\alpha\beta}^1 \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) + A_{\alpha\beta}^0 \right] \times \\ \times \exp \left[-p_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] f_c(r_{ij}), \quad (3)$$

где r_{ij} – расстояние между атомами с номерами i и j ; α и β – типы атомов; $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$, $r_0^{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}^0$ и $A_{\alpha\beta}^1$ – параметры потенциалов. Функция обрезания $f_c(r_{ij})$ и параметры потенциалов взяты из работы [19]. Межатомные потенциалы (1)–(3) хорошо зарекомендовали себя при моделировании формирования металлических [4, 28–30] и биметаллических [3, 5, 6] наноконтактов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Погружение СТМ-иглы в небольшой участок медно-платинового поверхностного сплава и последующее ее вытягивание приводят к формированию медно-платиновых наноконтактов. При этом в процессе взаимодействия СТМ-иглы с подложкой в области контакта образуется аморфная структура, что затрудняет выделение конкретных событий, отвечающих за переход атомов платины из подложки в область наноконтакта. Однако свойства наноконтактов зависят, в первую очередь, от количества атомов платины, вытянутых из поверхности и оказавшихся в области наноконтакта. Поэтому далее мы обсудим общие закономерности вытягивания атомов платины из подложки.

Зависимости числа вытянутых атомов платины N_{Pt} от числа атомов платины в подложке N_{Pt}^{substr}

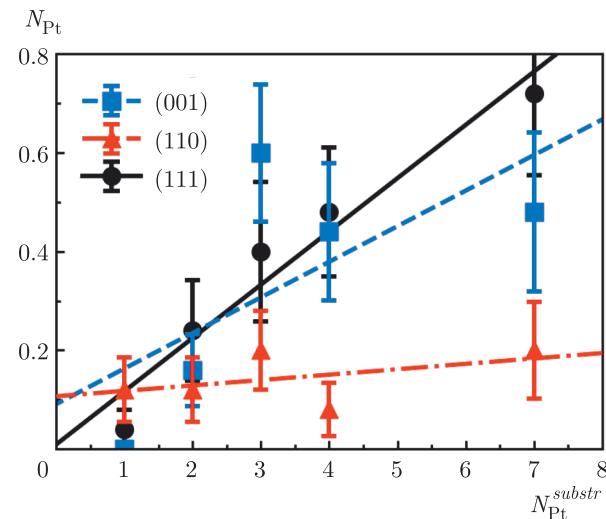


Рис. 3. Зависимости числа вытянутых из подложки атомов N_{Pt} от числа атомов платины в подложке N_{Pt}^{substr} при температуре 300 К и разных ориентациях СТМ-иглы

при температуре 300 К представлены на рис. 3³⁾. Зависимости $N_{Pt}(N_{Pt}^{substr})$ были аппроксимированы линейными функциями $N_{Pt} = aN_{Pt}^{substr} + b$, где коэффициенты были равны $a_{(001)} = 0.07 \pm 0.05$ и $b_{(001)} = 0.09 \pm 0.18$, $a_{(110)} = 0.011 \pm 0.012$ и $b_{(110)} = 0.11 \pm 0.05$, $a_{(111)} = 0.108 \pm 0.015$ и $b_{(111)} = 0.01 \pm 0.06$ в случае ориентации СТМ-иглы соответственно (001), (110) и (111). Для коэффициентов $a_{(ijk)}$ выполняются неравенства ($a_{(111)} > a_{(001)} > a_{(110)}$), аналогичные неравенствам для межплоскостных расстояний в идеальном кристалле меди ($d_{(111)} > d_{(001)} > d_{(110)}$), где $d_{(001)} = 1.808 \text{ \AA}$, $d_{(110)} = 1.278 \text{ \AA}$ и $d_{(111)} = 2.087 \text{ \AA}$. Среднее число вытянутых при погружении СТМ-иглы атомов платины может достигать величины $\langle N_{Pt} \rangle \approx 0.7$. Используя распределение Пуассона, оценим максимальную вероятность вытягивания атомов Pt: $1 - e^{-0.7} \approx 0.5$, таким образом вероятность формирования смешанного Pt–Cu-наноконтакта при погружении СТМ-иглы достигает 50 %.

Установленные зависимости числа вытянутых атомов платины от обратной температуры (в интервале температур 400–800 К) при наличии 7 атомов платины в подложке и различных ориентациях СТМ-иглы показаны на рис. 4. Полученные зависимости $N_{Pt}(T^{-1})$ были аппроксимированы экспоненциальной зависимостью

$$N_{Pt} = N_{(ijk)} \exp(-E_{(ijk)}/kT),$$

³⁾ Для получения каждой точки на рис. 3–6 было выполнено по 100 численных расчетов.

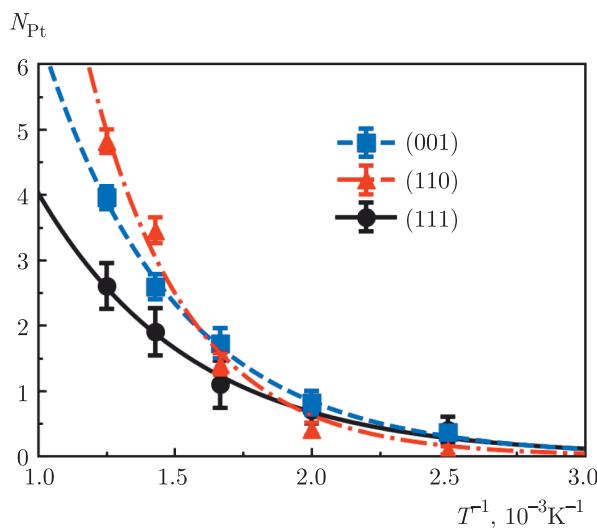


Рис. 4. Зависимости числа вытянутых из подложки атомов платины N_{Pt} от обратной температуры T^{-1} при разных ориентациях СТМ-иглы, если в первом слое поверхности Cu(111) размещены 7 атомов платины на расстоянии вторых ближайших соседей

где $N_{(001)} = 51 \pm 7$ и $E_{(001)} = 177 \pm 8$ мэВ, $N_{(110)} = 160 \pm 70$ и $E_{(110)} = 240 \pm 30$ мэВ, $N_{(111)} = 24 \pm 5$ и $E_{(111)} = 154 \pm 13$ эВ в случае ориентации СТМ-иглы соответственно (001), (110) и (111)⁴⁾. Физический смысл величин $E_{(ijk)}$ — энергия активации процесса вытягивания атомов платины из подложки Cu(111). На рис. 4 видно, что чем больше расстояние $d_{(ijk)}$ между слоями в СТМ-игле, тем меньше энергия активации вытягивания атомов ($E_{(111)} < E_{(001)} < E_{(110)}$). Полученные для энергии активации неравенства являются следствием того, что энергия связи атомов меди и платины больше энергии связи Pt-Pt и Cu-Cu [17], и атомы платины при перемещении между слоями притягивают атомы меди. В итоге, чем меньше расстояние между атомными слоями в СТМ-игле, тем больше энергия возникающих упругих деформаций и, соответственно, выше величина энергии активации процесса перемещения атома платины.

Полученные неравенства между коэффициентами $a_{(ijk)}$ и энергиями активации $E_{(ijk)}$, а также их однозначная связь с неравенствами для межплос-

⁴⁾ Отметим, что среднее число вытянутых атомов платины при температурах 300 К и 400 К оказывается одного порядка. Возможно, это означает, что механизмы формирования наноконтактов при температурах выше и ниже комнатной несколько отличаются. Однако этот вопрос требует дополнительного тщательного исследования, выходящего за пределы данной статьи.

костных расстояний $d_{(ijk)}$ позволяют нам сделать вывод, что атомы платины движутся в наноконтакте меди посредством прыжков между атомными плоскостями. Тогда энергию активации $E_{(ijk)}$ можно интерпретировать как эффективный диффузионный барьер для таких прыжков.

После вытягивания СТМ-иглы из подложки на поверхности остаются небольшие кластеры. Появление аналогичных кластеров было обнаружено ранее в ряде экспериментальных работ [31–34]. Радиус кластеров примерно равен радиусу контактного пятна, образующегося при погружении СТМ-иглы, и слабо зависит от количества атомов платины в поверхности меди. Поэтому далее мы ограничимся рассмотрением случая, когда в первом слое поверхности Cu(111) располагаются 7 атомов платины. Высота кластеров зависит, в первую очередь, от формы СТМ-иглы. Действительно, чем остree СТМ-игла, тем выше будет находиться область разрыва наноконтакта, и тем выше будет кластер, оставшийся после разрыва на поверхности подложки.

На рис. 5 представлено распределение атомов по слоям в кластере, образующемся на поверхности Cu(111) при температуре 300 К и различных ориентациях СТМ-иглы при наличии в первом слое поверхности 7 атомов платины. Видно, что кластер имеет конусообразную форму, обусловленную утончением области разрыва наноконтакта при вытягивании СТМ-иглы. При ориентации СТМ-иглы (110), (001) и (111) кластер состоит преимущественно из одного, двух и трех плотно упакованных атомных слоев.

На рис. 6 показана зависимость числа атомов в кластере $N_{\text{cluster}}^{\text{atoms}}$ от обратной температуры T^{-1} при наличии 7 атомов платины в подложке и различных ориентациях СТМ-иглы. Зависимости $N_{\text{cluster}}^{\text{atoms}}(T^{-1})$ могут быть аппроксимированы формулой

$$N_{\text{cluster}}^{\text{atoms}} = A + \tilde{N} \exp(-\tilde{E}/kT),$$

где $A_{(001)} = 24.8 \pm 1.1$, $\tilde{N}_{(001)} = (8 \pm 5) \cdot 10^3$ и $\tilde{E}_{(001)} = 370 \pm 40$ мэВ, $A_{(110)} = 13.3 \pm 1.0$, $\tilde{N}_{(110)} = 150 \pm 60$ и $\tilde{E}_{(110)} = 162 \pm 29$ мэВ, $A_{(111)} = 42.2 \pm 1.5$, $\tilde{N}_{(111)} = (140 \pm 140) \cdot 10^3$ и $\tilde{E}_{(111)} = 540 \pm 70$ мэВ в случае ориентаций СТМ-иглы соответственно (001), (110) и (111). Коэффициент $A_{(ijk)}$ характеризует асимптотическое поведение зависимости $N_{\text{cluster}}^{\text{atoms}}(T)$ при низких температурах, а коэффициент $\tilde{E}_{(ijk)}$ имеет физический смысл энергии активации процесса увеличения размера кластера. Как уже отмечалось выше, при низких температурах высота кластеров, а следовательно, и чис-

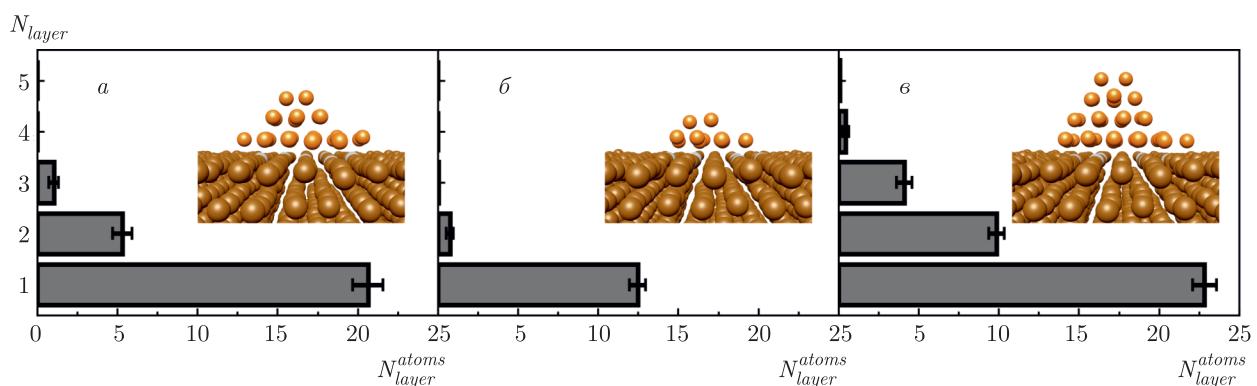


Рис. 5. Зависимость суммарного числа атомов (Cu и Pt) в кластере на поверхности Cu(111) от номера слоя при температуре 300 К и различных ориентациях СТМ-иглы, если в первом слое поверхности расположены 7 атомов платины: *а* — (001), *б* — (110) и *в* — (111). На вставках приведены примеры кластеров, остающихся после вытягивания СТМ-иглы. Коричневым и оранжевым цветом показаны атомы меди соответственно из подложки и СТМ-иглы. Серым цветом — атомы платины

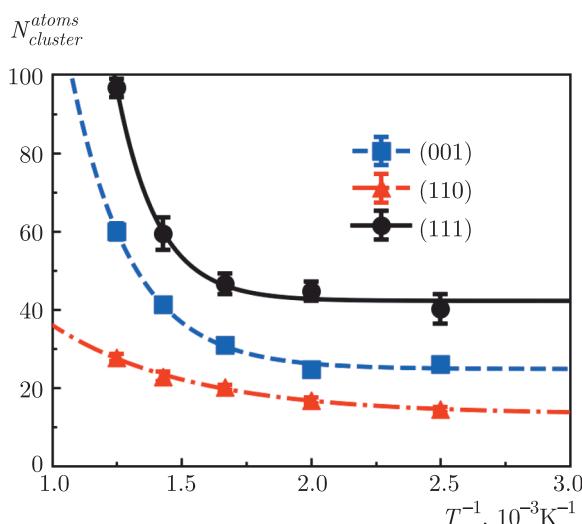


Рис. 6. Зависимости числа атомов в кластере $N_{cluster}^{atoms}$ от обратной температуры (T^{-1}) при разных ориентациях СТМ-иглы, если в первом слое поверхности Cu(111) размещены 7 атомов платины на расстоянии вторых ближайших соседей

ло атомов в них, зависит от формы СТМ-иглы. Поэтому коэффициент $A_{(ijk)}$ максимальен для наиболее острой иглы с ориентацией (111) и минимальен для наиболее тупой иглы с ориентацией (110). Увеличение размеров кластеров, остающихся на поверхности, при увеличении температуры связано с активацией диффузии атомов Cu в направлении от СТМ-иглы к поверхности Cu(111). Действительно, в результате такой диффузии область разрыва наноконтакта смещается в сторону основания СТМ-иглы, что и приводит в увеличению размеров класте-

ров. Для энергий активации этого процесса выполняются неравенства ($\tilde{E}_{(111)} > \tilde{E}_{(001)} > \tilde{E}_{(110)}$) обратные по отношению к неравенствам для энергий активации $E_{(ijk)}$ процесса вытягивания атомов платины из подложки Cu(111). Это означает, что вытянутые из подложки атомы Pt замедляют процесс диффузии атомов Cu в области наноконтакта и препятствуют смещению области разрыва наноконтакта в сторону основания СТМ-иглы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода молекулярной динамики были исследованы процессы формирования наноконтактов, образующихся при взаимодействии медной СТМ-иглы с небольшими участками поверхностного сплава Pt/Cu(111). Установлено, что наибольшая вероятность формирования смешанного Pt-Cu-наноконтакта соответствует погружению СТМ-иглы с ориентацией (111) в участок поверхностного сплава Cu(111) $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pt с 7 атомами платины и может достигать 50 %. Анализ энергий активации $E_{(ijk)}$ и $\tilde{E}_{(ijk)}$ показал, что атомы Pt движутся в наноконтакте меди посредством прыжков по атомным слоям в направлении от поверхности меди к основанию СТМ-иглы. При этом атомы Cu движутся в противоположном направлении, что при повышении температуры приводит к смещению области разрыва наноконтакта в сторону основания СТМ-иглы. После разрыва наноконтакта на поверхности Cu(111) остаются небольшие конусообразные кластеры, состоящие из атомов меди и платины, размер которых определяется, в первую очередь, размером контактного пятна и формой СТМ-иглы.

Представленные результаты указывают на перспективность экспериментальной реализации метода получения и дальнейшего исследования Pt-Cu-наноконтактов путем погружения СТМ-иглы в небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111).

Благодарности. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М. В. Ломоносова [35, 36].

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-72-20034).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science* **294**, 1488 (2001).
2. А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий, УФН **185**, 1009 (2015).
3. A. L. Klavsyuk, S. V. Kolesnikov, I. K. Gainullin, and A. M. Saletsky, *Eur. Phys. J. B* **85**, 331 (2012).
4. S. V. Kolesnikov, I. N. Kolesnikova, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, *Europhys. Lett.* **103**, 48002 (2013).
5. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 16136 (2020).
6. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, ЖЭТФ **158**, 858 (2020).
7. J. M. Krans, J. M. van Ruitenbeek, V. V. Fisun, I. K. Yanson, and L. J. de Jongh, *Nature* **375**, 767 (1995).
8. V. Rodrigues, T. Fuhrer, and D. Ugarte, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4124 (2000).
9. H. Ohnishi, Y. Kondo, and K. Takayanagi, *Nature* **395**, 780 (1998).
10. F. Yang, R. W. Carpick, and D. J. Srolovitz, *ACS Nano* **11**, 490 (2017).
11. U. Landman, W. D. Luedtke, N. A. Burnham, and R. J. Colton, *Science* **248**, 454 (1990).
12. J. I. Pascual, J. Méndez, J. Gómez-Herrero, A. M. Baró, N. García, U. Landman, W. D. Luedtke, E. N. Boagachek, and H. P. Cheng, *Science* **267**, 1793 (1995).
13. J. Mei, J. Li, Y. Ni, and H. Wang, *Nanoscale Res. Lett.* **5**, 692 (2010).
14. J. Mei and Y. Ni, *Thin Solid Films* **566**, 45 (2014).
15. G. Singh, K. Kumara, and R. K. Moudgil, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 20965 (2019).
16. F. R. Lucci, T. J. Lawton, A. Pronschinske, and E. C. H. Sykes, *J. Phys. Chem. C* **118**, 3015 (2014).
17. S. Dokukin, S. Kolesnikov, A. Saletsky, and A. Klavsyuk, *J. Alloys Compd.* **763**, 719 (2018).
18. S. Dokukin, S. Kolesnikov, and A. Saletsky, *Surf. Sci.* **689**, 121464 (2019).
19. S. Dokukin, S. Kolesnikov, A. Saletsky, and A. Klavsyuk, *Surf. Sci.* **692**, 121515 (2020).
20. S. Nosé, *Mol. Phys.* **52**, 255 (1984).
21. W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
22. C. H. Wang, K. C. Chao, T. H. Fang, I. Stachiv, and S. F. Hsieh, *J. Alloys Compd.* **659**, 224 (2016).
23. M. A. Fernández, C. Sabater, W. Dednam, J. J. Palacios, M. R. Calvo, C. Untiedt, and M. J. Caturla, *Phys. Rev. B* **93**, 085437 (2016).
24. R. Hoffmann-Vogel, *Appl. Phys. Rev.* **4**, 031302 (2017).
25. V. Rosato, M. Guillope, and B. Legrand, *Philos. Mag. A* **59**, 321 (1989).
26. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
27. N. A. Levanov, V. S. Stepnyuk, W. Hergert, D. I. Bazhanov, P. H. Dederichs, A. Katsnelson, and C. Massobrio, *Phys. Rev. B* **61**, 2230 (2000).
28. F. Sato, A. S. Moreira, J. Bettini, P. Z. Coura, S. Dantas, D. Ugarte, and D. Galvao, *Phys. Rev. B* **74**, 193401 (2006).
29. Q. Pu, Y. Leng, L. Tsetseris, H. S. Park, S. T. Pantelides, and P. T. Cummings, *J. Chem. Phys.* **126**, 144707 (2007).
30. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий, Письма в ЖЭТФ **91**, 169 (2010).

31. J. I. Pascual, J. Méndez, J. Gómez-Herrero, A. M. Barro, N. García, and V. T. Binh, Phys. Rev. Lett. **71**, 1852 (1993).
32. J. G. Rodrigo, V. Crespo, H. Suderow, S. Vieira, and F. Guinea, New J. Phys. **15**, 055020 (2013).
33. W. Dednam, C. Sabater, O. Tal, J. J. Palacios, A. E. Botha, and M. J. Caturla, Phys. Rev. B **102**, 245415 (2020).
34. W. Dednam, C. Sabater, M. R. Calvo, C. Untiedt, J. J. Palacios, A. E. Botha, and M. J. Caturla, Phys. Rev. B **101**, 165417 (2020).
35. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, “*Lomonosov*”: *Supercomputing at Moscow State University*, Boca Raton, United States (2013).
36. V. Voevodin, A. Antonov, D. Nikitenko, P. Shvets, S. Sobolev, I. Sidorov, K. Stefanov, V. Voevodin, and S. Zhumatiy, Supercomput. Front. Innov. **6**, 4 (2019).