

ФОРМИРОВАНИЕ ДЕНДРИТОВ Pt/Cu НА СТУПЕНЯХ ПОВЕРХНОСТИ Cu(111)

С. А. Докужин^{a,b}, С. В. Колесников^{a*}, А. М. Салецкий^a

^a Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет
119234, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 30 мая 2022 г.,
после переработки 20 июня 2022 г.
Принята к публикации 29 июня 2022 г.

Формирование кластеров Pt/Cu на ступенчатой поверхности Cu(111) исследовано теоретически с помощью самообучающегося кинетического метода Монте-Карло. Показано, что, варьируя условия роста кластеров Pt/Cu, можно добиться формирования различных наноструктур: вытянутых и разветвленных дендритов, а также пальцеобразных выступов различной формы. Установлено, что форма кластеров определяется в основном тремя параметрами: температурой системы, относительной концентрацией платины и типом ступени, на которой происходит рост кластера. Для роста дендритов необходимо выполнение двух условий: температура системы должна быть около 200 К или ниже, и в системе должны присутствовать атомы Pt. При этом, в зависимости от типа ступени растут либо дендриты, вытянутые в направлении перпендикулярно ступени, либо сильно разветвленные дендриты. При комнатной температуре на ступенях растут пальцеобразные выступы, причем их длина также зависит от типа ступени. Различие формы кластеров на различных ступенях является следствием анизотропии диффузии атомов вблизи углов кластеров и может быть объяснено исходя из анализа энергетических барьеров для прыжков атомов по поверхности Cu(111).

DOI: 10.31857/S0044451022110098
EDN: KZGCMN

1. ВВЕДЕНИЕ

Рост кластеров в виде плоских дендритов часто наблюдается в металлических гомо- и гетероэпитаксиальных системах. Например, в системе Au/Ir(111) [1] плоские дендриты формируются при комнатной температуре, в системе Co/Cu(111) [2] — при температуре 135 К, в системах Ag/Pt(111) и Ag/Ag(111) [3] — при температурах около 100 К. Интерес к плоским дендритам связан не только с их красотой, но и с их необычными физическими и химическими свойствами, такими как высокая каталитическая активность [4,5], а также с перспективами создания электрохимических устройств хранения энергии [6]. Важно отметить, что рост плоских дендритов является результатом атомной самоорга-

низации, и его можно контролировать с помощью изменения внешних условий, таких как температура и скорость напыления атомов.

Форма плоских дендритов связана с симметрией поверхности подложки. На поверхностях (111) ГЦК-кристаллов или на поверхностях (0001) ГПУ-кристаллов возможны два типа ступеней (А и В). Если энергии атомов на ступенях А и В различаются, это приводит к появлению анизотропии диффузионных барьеров для обхода углов растущего кластера. В результате наблюдается формирование плоских дендритов, обладающих осью симметрии третьего порядка. Рост таких дендритов был экспериментально обнаружен в эпитаксиальных системах Au/Pt(111) [7], Co/Cu(111) [2], Co/Pd(111) [8], Pt/Ru(0001) [9], Pd/Cu(111) [10].

Если анизотропией диффузионных барьеров для обхода углов кластера можно пренебречь по сравнению с энергией теплового движения, то плоские дендриты будут обладать осью симметрии ше-

* E-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

стого порядка. Формирование таких дендритов было обнаружено при температуре, близкой к комнатной, в ряде эпитаксиальных систем, таких как Au/Ru(0001) [11], Ag/Pt(111) [12] и Fe/Ag(111) [13].

Если энергия теплового движения сравнима с анизотропией диффузионных барьеров для обхода углов кластера, то плоские дендриты принимают некоторую промежуточную форму, не обладающую какой бы то ни было ярко выраженной симметрией. Такие несимметричные плоские дендриты формируются, например, в эпитаксиальной системе Ag/Ni(111) при температуре ниже 800 К [14] и в системе Ag/Re(0001) при комнатной температуре [15].

Теоретические методы исследования формирования плоских дендритов можно разделить на три группы: 1) методы, основанные на приближении сплошной среды [16, 17]; 2) различные вариации модели диффузионно-лимитированного роста [18–20]; 3) кинетический метод Монте-Карло (КММК) [1, 21]. Фрактальная размерность плоских дендритов существенно зависит от величины эффективного барьера диффузии атомов вдоль границ дендрита. Результаты КММК-моделирования [1, 21] показывают, что чем меньше величина этого барьера, тем ближе форма дендрита к компактному кластеру.

Наличие на поверхности атомных ступеней может привести к существенному изменению морфологии растущих структур. Например, при напылении Pt на ровную поверхность Cu(111) при комнатной температуре наблюдается рост дендритов [22], а на ступенчатой поверхности при тех же условиях формируются пальцеобразные выступы [23]. Механизмы роста и структура пальцеобразных выступов были объяснены с помощью моделирования методом КММК [24]. При этом предполагалось, что на поверхность меди напыляются только атомы Pt. Аналогичный подход был использован и для объяснения роста дендритов на ровной поверхности Cu(111) [21]. Было показано, что возможно получение разнообразных наноструктур при одновременном напылении атомов Pt и Cu. Однако вопрос о том, формирование каких структур возможно при одновременном напылении атомов Pt и Cu на ступенчатую поверхность Cu(111), остается до сих пор не изученным. Исследованию этого вопроса и посвящена данная работа.

2. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Для моделирования роста дендритов на ступенях поверхности Cu(111) используется та же методика, что и для исследования роста дендритов на ровной поверхности [21] и пальцеобразных выступов на ступенчатой поверхности Cu(111) [24].

Потенциальная энергия взаимодействия атомов Cu и Pt вычисляется в приближении сильной связи [25, 26]:

$$E = \sum_i (E_R^i + E_B^i), \quad (1)$$

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

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

где r_{ij} — расстояние между атомами i и j , α и β — типы атомов, $r_0^{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}^0$, $A_{\alpha\beta}^1$, $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$ — параметры межатомного взаимодействия, зависящие от свойств металлов, входящих в систему, $f_c(r_{ij})$ — функция обрезания потенциалов. Вид функции обрезания и параметры межатомного взаимодействия взяты из работы [27]. Потенциалы (1)–(3) хорошо зарекомендовали себя при исследовании формирования различных нанообъектов: кластеров [21], пальцеобразных выступов [24], поверхностных сплавов [27], связанных наноструктур в первом слое поверхности [28, 29], наноконтактов [30, 31].

Для реалистичного моделирования роста дендритов использован самообучающийся кинетический метод Монте-Карло (СОКММК) [32]. По сравнению с обычными КММК-моделями СОКММК-метод обладает следующими преимуществами: 1) энергетические барьеры ΔE_i различных событий вычисляются по требованию¹⁾; 2) величины ΔE_i сохраняются в базе данных; 3) они могут быть использованы повторно в аналогичных физических ситуациях. Для вычисления барьеров ΔE_i мы используем метод упругой ленты (nudged elastic band, NEB) [33]. Для ускорения вычислений применяется метод средней частоты [34] и эффективный алгоритм поиска потенциальных ям [35]. Аналогичный

¹⁾ В англоязычной литературе используется термин “on the fly.”

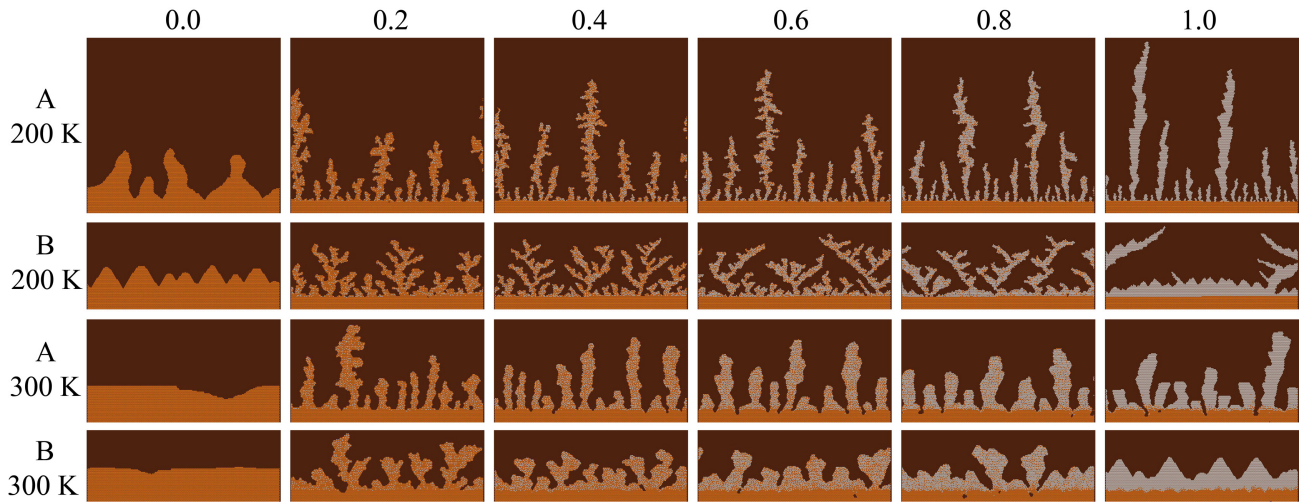


Рис. 1. Изображения части вычислительной ячейки (вид сверху) после напыления 10000 атомов. Оранжевыми и серыми точками показаны атомы Cu и Pt, соответственно. Относительная концентрация платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$ показана на рисунке сверху, а слева указаны температура системы и тип ступени (А или В)

подход использовался ранее для исследования самоорганизации связанных наноструктур из атомов Co и Fe в первом слое поверхности Cu(001) [28, 29].

Как и в работах [21, 24], мы рассматриваем однослойную модель. Сравнение с экспериментом [22, 23] показывает, что данное приближение оправдано при небольшом количестве напыляемых атомов. При этом рассматриваются только прыжки одиночных атомов в соседние узлы кристаллической решетки, поскольку учет более сложных событий в системе Pt/Cu(111) не приводит к появлению качественно новых результатов [36].

Частоты прыжков атомов вычисляются по формуле

$$\nu_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}\right), \quad (4)$$

где T — температура системы, k — постоянная Больцмана, частотный предэкспоненциальный множитель ν_0 выбран равным 1 ТГц [37, 38]. Напыление атомов моделируется путем добавления новых атомов в свободные узлы кристаллической решетки. Частота появления новых атомов равна $\nu_+ = FN$, где F — скорость напыления атомов, $N = 10^5$ — число узлов кристаллической решетки в вычислительной ячейке (200×500 узлов). Мы рассматриваем формирование дендритов при различных соотношениях между концентрациями платины n_{Pt} и меди n_{Cu} . Поэтому удобно ввести безразмерный параметр: относительную концентрацию атомов пла-

тины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$, изменяющуюся в пределах от 0 до 1. При этом скорость напыления атомов равна $F = F_{Pt} + F_{Cu}$, где $F_{Pt}/F_{Cu} = n_{Pt}/n_{Cu}$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как было показано в работе [21], форма и структура дендритов определяются в основном температурой T системы и отношением концентраций n_{Pt}/n_{Cu} , а зависимость от скорости напыления F оказывается достаточно слабой. Например, длина периметра дендрита оказывается пропорциональной $\ln F$. Поэтому в данной работе мы не будем останавливаться на исследовании зависимости характеристик дендритов от F . Все представленные ниже результаты получены при скорости напыления атомов $F = 0.01$ монслоев/с, что соответствует частоте появления новых атомов в вычислительной ячейке $\nu_+ = 1000 \text{ с}^{-1}$.

На рис. 1 показаны результаты моделирования, полученные через 10 с после начала напыления атомов на ступенчатую поверхность Cu(111). Хорошо видно, что форма формирующихся кластеров зависит от трех параметров: температуры T , относительной концентраций платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$ и типа ступени, на которой растут кластеры. В качестве количественной характеристики формы кластеров рассмотрим относительную (суммарную по вычислительной ячейке) длину L/L_0 краев кластеров, где

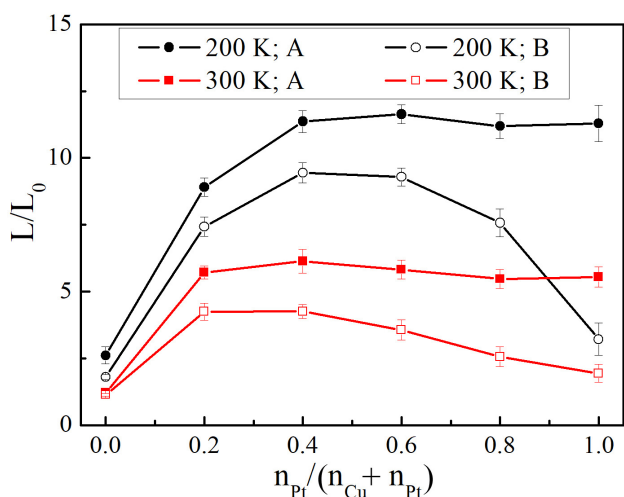


Рис. 2. Зависимость относительной длины L/L_0 краев кластеров от относительной концентрации платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$

$L_0 = 200$ атомов – длина ровной ступени в вычислительной ячейке.

Из рис. 1 видно, что для роста дендритов температуру системы необходимо понизить примерно до 200 К. Однако даже при этих условиях дендриты не формируются при напылении чистой меди. Формирование дендритов происходит только при условии добавления в систему атомов Pt. Обращает на себя внимание существенное различие формы дендритов, растущих на ступенях разного типа. На ступени А растут дендриты, вытянутые в направлении перпендикулярно ступени, причем их длина слабо зависит от концентрации Pt при $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt}) > 0.4$ (см. рис. 2). При тех же условиях на ступени В растут сильно разветвленные дендриты. Длина их границы максимальна при $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt}) = 0.4$ и убывает при большей концентрации Pt.

При комнатной температуре дендриты не формируются. Вместо этого на ступенях растут пальцеобразные выступы, которые наследуют форму описанных выше дендритов, т.е. на ступени А выступы оказываются более длинными и тонкими, чем на ступени В. Интересно отметить, что в случае напыления чистой платины выступы на ступени В приобретают ярко выраженную треугольную форму. На рис. 2 видно, что при всех рассмотренных концентрациях платины и температурах относительная длина краев кластеров на ступени А оказывается больше, чем относительная длина краев кластеров на ступени В.

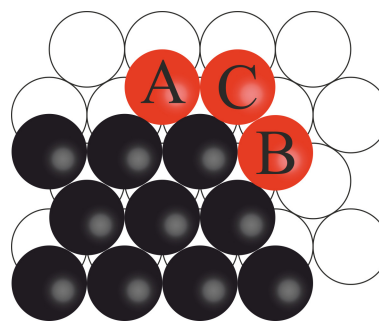


Рис. 3. Схематическое изображение (вид сверху) угла кластера на поверхности (111). Черные шарики изображают атомы сорта 1, красные — атомы сорта 2, белые — атомы меди в нижнем слое. Атом сорта 2 может находиться на ступени А, на ступени В или в угловом положении С

Таблица 1. Энергетические барьеры (в эВ) для обхода атомами сорта 2 угла кластера, состоящего из атомов сорта 1. Положения атома А, В и С показаны на рис. 3.

Сорт 1	Сорт 2	A → C	C → A	B → C	C → B
Cu	Cu	0.29	0.02	0.40	0.13
Pt	Pt	0.34	0.02	0.64	0.26
Cu	Pt	0.48	0.02	0.62	0.14
Pt	Cu	0.38	0.05	0.42	0.07

Форма кластеров определяется диффузией атомов вблизи углов кластера. Обсудим этот вопрос на примере кластеров из чистой меди и чистой платины. Угол кластера схематически изображен на рис. 3. Вблизи угла кластера может находиться атом Cu или Pt. Этот дополнительный атом может находиться либо на ступени А (положение А), либо на ступени В (положение В), либо в угловом положении С. Энергетические барьеры для прыжков атома между этими положениями приведены в таблице 1.

Рассмотрим прыжки атома Cu вблизи угла медного кластера. Потенциальная энергия атома Cu на ступени А и на ступени В одинакова, однако диффузионные барьеры на путях $A \rightarrow C \rightarrow B$ и $B \rightarrow C \rightarrow A$ различны. На пути $A \rightarrow C \rightarrow B$ атом преодолевает сначала барьер $\Delta E_{A \rightarrow C} = 0.29$ эВ, а затем барьер $\Delta E_{C \rightarrow B} = 0.13$ эВ. На обратном пути — сначала барьер $\Delta E_{B \rightarrow C} = 0.40$ эВ, а затем барьер $\Delta E_{C \rightarrow A} = 0.02$ эВ. Таким образом, эффективный барьер для обхода угла в любом направлении одинаков: $\Delta E_{eff} = 0.42$ эВ²⁾. Следовательно, эффективная частота угловой диффузии атомов Cu равна

²⁾ $\Delta E_{eff} = \Delta E_{A \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow B} = \Delta E_{B \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow A}$

$\nu_{eff} = \nu_0 \exp(-\Delta E_{eff}/kT) = 8.8 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ при 300 К и $\nu_{eff} = 26 \text{ с}^{-1}$ при 200 К. Подвижность атомов по периметру кластера определяется отношением эффективной частоты угловой диффузии ν_{eff} и частоты напыления атомов $\nu_+ = 10^3 \text{ с}^{-1}$. Видно, что выполняются неравенства

$$\nu_{eff}(T = 300 \text{ К}) \gg \nu_+ \gg \nu_{eff}(T = 200 \text{ К}). \quad (5)$$

Следовательно, при температуре 300 К атомы Cu свободно движутся вдоль границы кластеров меди, что приводит к формированию ровной ступени. Однако при температуре 200 К атомы Cu не успевают обходить углы кластеров до появления новых атомов, поэтому анизотропия диффузионных барьеров $\Delta E_{C \rightarrow A}$ и $\Delta E_{C \rightarrow B}$ начинает играть ключевую роль. Если атом Cu оказывается в угловом положении (C), то вероятность его перехода на ступень A в $\exp((\Delta E_{C \rightarrow B} - \Delta E_{C \rightarrow A})/kT) \approx 590$ раз больше, чем на ступень B. В результате кластер меди растет в направлениях, перпендикулярных ступени A. Таким образом, на ступени A кластеры растут преимущественно перпендикулярно ступени, а на ступени B — под углом 60° к ней, образуя треугольные выступы.

Рассмотрим теперь рост кластера из чистой платины. Энергетические барьеры для прыжков атома Pt вблизи угла кластера платины приведены в таблице 1. Для оценки эффективной частоты угловой диффузии можно использовать усредненное значение эффективного барьера $\Delta E_{eff} = 0.63 \text{ эВ}$ ³⁾. Тогда эффективная частота угловой диффузии равна $\nu_{eff} = 26 \text{ с}^{-1}$ при 300 К и $\nu_{eff} = 1.3 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ при 200 К, т.е. выполняются неравенства

$$\nu_+ \gg \nu_{eff}(T = 300 \text{ К}) \gg \nu_{eff}(T = 200 \text{ К}), \quad (6)$$

и атомы Pt не успевают обходить углы кластера даже при комнатной температуре. Следовательно, если атом Pt оказывается в угловом положении (C), он при температуре 300 К (200 К) переходит на ступень A в $\exp((\Delta E_{C \rightarrow B} - \Delta E_{C \rightarrow A})/kT) = 1.1 \cdot 10^4$ ($1.1 \cdot 10^6$) раз чаще, чем на ступень B, несмотря на то, что оказаться на ступени B ему выгоднее с энергетической точки зрения. В результате кластеры из чистой платины на ступени A растут преимущественно перпендикулярно ступени, а на ступени B — под углом 60° к ней, образуя треугольные выступы при 300 К и разветвленные дендриты при 200 К.

Анализ энергетических барьеров в случае смешанных Pt–Cu-кластеров существенно усложняет-

ся в связи с большим числом возможных комбинаций атомов Cu и Pt вблизи угла кластера. Рассмотрим две простейшие ситуации: 1) диффузия атома Pt вблизи угла кластера меди и 2) диффузия атома Cu вблизи угла кластера платины. В первом случае ситуация аналогична рассмотренному выше случаю кластеров из чистой платины. Эффективный барьер для обхода угла кластера равен 0.63 эВ, и выполняются неравенства (6). А во втором случае эффективный барьер для обхода угла кластера равен 0.46 эВ, и выполняются неравенства (5). Т.е. ситуация аналогична случаю кластеров из чистой меди. Таким образом, из анализа энергетических барьеров, приведенных в таблице 1, следует общая тенденция: кластеры на ступени A растут преимущественно перпендикулярно ступени, а на ступени B — под углом 60° к ней.

Наконец, сделаем одно важное замечание. Обычно при исследовании дендритов на ровной поверхности их характеризуют фрактальной размерностью [1, 18–21]. Однако при росте на ступенях дендриты Pt–Cu быстро срастаются между собой, не образуя самоподобных структур. В результате вычисление фрактальной размерности таких дендритов теряет смысл. В отличие от фрактальной размерности относительная длина L/L_0 краев кластеров всегда имеет смысл, поэтому именно она была вычислена в нашей работе (см. рис. 2).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Моделирование роста кластеров Pt/Cu на ступенчатой поверхности Cu(111) показало, что их форма определяется в основном тремя параметрами: температурой системы, относительной концентрацией платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$ и типом ступени, на которой происходит рост кластеров. Для роста дендритов необходимо выполнение двух условий: температура системы должна быть около 200 К или ниже, и в системе должны присутствовать атомы Pt. На ступенях разного типа формируются дендриты существенно различной формы. На ступени A растут дендриты, вытянутые в направлении перпендикулярно ступени, а на ступени B — сильно разветвленные дендриты. Сильное различие формы дендритов объясняется анизотропией диффузии атомов вблизи углов кластеров. Из анализа энергетических барьеров видно, что дендриты на ступени A растут преимущественно перпендикулярно ступени, поэтому они оказываются узкими и длинными. На ступени B дендриты растут под углом 60° к ней,

³⁾ $\Delta E_{eff} = (\Delta E_{A \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow B} + \Delta E_{B \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow A})/2$

в результате чего оказываются более разветвленными и могут срастаться между собой. При комнатной температуре на ступенях растут пальцеобразные выступы, причем на ступени А выступы оказываются более длинными и тонкими, чем на ступени В. При всех рассмотренных концентрациях Pt и температурах относительная длина краев кластеров на ступени А оказывается больше, чем относительная длина краев кластеров на ступени В.

В результате мы показали, что, варьируя условия роста кластеров Pt/Cu на ступенчатой поверхности Cu(111), можно добиться формирования различных наноструктур: вытянутых и разветвленных дендритов, а также пальцеобразных выступов различной формы. Поскольку физические и химические свойства кластеров связаны с их формой, мы надеемся, что полученные результаты будут полезны для дальнейшего экспериментального изучения кластеров Pt/Cu и их применения в промышленности.

Благодарности. При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ) [39, 40].

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

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Ogura, K. Fukutani, M. Matsumoto, T. Okano, M. Okada, and T. Kawamura, *Phys. Rev. B* **73**, 125442 (2006).
2. N. N. Negulyaev, V. S. Stepanyuk, P. Bruno, L. Diekhöner, P. Wahl, and K. Kern, *Phys. Rev. B* **77**, 125437 (2008).
3. H. Brune, H. Roder, K. Bromann, K. Kern, J. Jacobsen, P. Stoltze, K. Jacobsen, and J. Norskov, *Surf. Sci.* **349**, L115 (1996).
4. H. Zhang, H. Wang, J. Cao, and Y. Ni, *J. Alloys Compd.* **698**, 654 (2017).
5. Md.H. Rashid, and T. K. Mandal, *J. Phys. Chem. C* **111**, 16750 (2007).
6. R. Ramkumar and M. M. Sundaram, *New J. Chem.* **40**, 7456 (2016).
7. E. Sibert, F. Ozanam, F. Maroun, R. J. Behm, and O. M. Magnussen, *Surf. Sci.* **572**, 115 (2004).
8. M. Wasniowska, W. Wulfhekel, M. Przybylski, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **78**, 035405 (2008).
9. U. Käsberger and P. Jakob, *Surf. Sci.* **540**, 76 (2003).
10. A. Bach Aaen, E. Lægsgaard, A. V. Ruban, and I. Stensgaard, *Surf. Sci.* **408**, 43 (1998).
11. R. Q. Hwang, J. Schröder, C. Günther, and R. J. Behm, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3279 (1991).
12. H. Röder, K. Bromann, H. Brune, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3217 (1995).
13. F. Buchner, *STM Investigation of Molecular Architectures of Porphyrinoids on a Ag(111) Surface: Supramolecular Ordering, Electronic Properties and Reactivity*, Springer, Berlin (2010).
14. A. Meyer, J. I. Flege, R. E. Rettew, S. D. Senanayake, T. Schmidt, F. M. Alamgir, and J. Falta, *Phys. Rev. B* **82**, 085424 (2010).
15. M. Parschau, D. Schlatterbeck, and K. Christmann, *Surf. Sci.* **376**, 133 (1997).
16. J. Lipton, M. E. Glicksman, and W. Kurz, *Mater. Sci. Eng.* **65**, 57 (1984).
17. M. X. Liu, K. Wang, D. Xia, and T. Jiang, *J. Alloys Compd.* **589**, 431 (2014).
18. T. A. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1400 (1981).
19. T. A. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. B* **27**, 5686 (1983).
20. А. Ю. Лоскутов, А. С. Михайлов, *Основы теории сложных систем*, Институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2007).
21. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Surf. Sci.* **689**, 121464 (2019).
22. E. Soy, Z. Liang, and M. Trenary, *J. Phys. Chem. C* **119**, 24796 (2015).
23. F. R. Lucci, T. J. Lawton, A. Pronschinske, and E. C. H. Sykes, *J. Phys. Chem. C* **118**, 3015 (2014).
24. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *J. Alloys Compd.* **763**, 719 (2018).
25. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
26. N. A. Levanov, V. S. Stepanyuk, W. Hergert, D. I. Bazhanov, P. H. Dederichs, A. Katsnelson, and C. Massobrio, *Phys. Rev. B* **61**, 2230 (2000).
27. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *Surf. Sci.* **692**, 121515 (2020).
28. С. В. Колесников, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 329 (2014).

29. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, *ЖЭТФ* **148**, 706 (2015).
30. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, *ЖЭТФ* **158**, 858 (2020).
31. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, *ЖЭТФ* **160**, 426 (2021).
32. С. В. Колесников, А. М. Салецкий, С. А. Докукин, А. Л. Клавсюк, *Матем. моделирование* **30**, 48 (2018).
33. G. Henkelman and H. Jónsson, *J. Chem. Phys.* **113**, 9978 (2000).
34. B. Puchala, M. L. Falk, and K. Garikipati, *J. Chem. Phys.* **132**, 134104 (2010).
35. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Comput. Mater. Sci.* **155**, 209 (2018).
36. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, *Вестник Моск. ун-та. Серия 3. Физика и Астрономия* вып 4, 46 (2019).
37. U. Kürpick, *Phys. Rev. B* **64**, 075418 (2001).
38. U. Kürpick, *Phys. Rev. B* **66**, 165431 (2002).
39. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, *“Lomonosov”: Supercomputing at Moscow State University*, Chapman Hall/CRC Computational Science, Boca Raton, United States, 283307 (2013).
40. 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).