

05,12

## Исследование влияния кислорода на свойства магнитной анизотропии нанопроводов Co на поверхности Cu(210): *ab initio* подход

© Ю.Г. Коробова<sup>1</sup>, Д.И. Бажанов<sup>1</sup>, И.А. Камынина<sup>1</sup>, К.К. Абгарян<sup>2</sup>, А.С. Илюшин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup> Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup> Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН, Грозный, Россия

E-mail: korobovajg@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 16 декабря 2014 г.)

В окончательной редакции 2 февраля 2015 г.)

Из первых принципов методами теории функционала электронной плотности проведено исследование магнитных свойств нанопроводов Co на чистой и реконструированной кислородом поверхности Cu(210). В результате проведенных расчетов показано, что исследуемые нанопровода на чистой поверхности Cu(210) обладают высоким магнитным моментом и небольшой по величине энергией магнитной анизотропии. Однако изучение влияния реконструкции поверхности меди кислородом показало, что в нанопроводах Co на окисленной поверхности (2 × 1)O-Cu(210) наблюдается существенное увеличение энергии магнитной анизотропии в проводе, что связано с изменением величины проекции углового орбитального момента атомов Co после адсорбции кислорода на поверхность. При этом реконструкция поверхности кислородом привела к изменению направления оси легкого намагничивания, что согласуется с экспериментальными данными по самоорганизационному росту Co-проводов на нитризированной поверхности Cu(210).

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 11-02-122256-офи\_м, 13-02-01322-а.

Для создания магнитных устройств памяти с высокой плотностью записи информации требуются материалы с высокой магнитной анизотропией. Поскольку низкоразмерные структуры обладают анизотропией, в них есть четко выраженное направление, в котором физические свойства сильно отличаются от свойств в других направлениях. Следовательно, именно в таких низкоразмерных структурах наиболее вероятно обнаружение сильной магнитной анизотропии. С другой стороны, уменьшение размерности понижает атомное координационное число и повышает спиновый и орбитальный магнитные моменты материала. Поэтому низкоразмерные структуры, такие как ультратонкие пленки, провода или цепочки атомов, сейчас интенсивно исследуются теоретически и экспериментально. За последнее десятилетие достигнут большой прогресс в создании наноструктурированных объектов с помощью сканирующего туннельного микроскопа, который позволяет не только „видеть“ атомы, но и прецизионно располагать их на поверхности подложки атом за атомом [1]. Кроме того, стали проводиться исследования по самоорганизационному росту металлических нанопроводов на различных подложках. После первых экспериментов по исследованию магнетизма Fe-полос на поверхностях W(110) и Cu(111) [2–5] исследования в этом направлении стали проводиться и для других квазиодномерных систем, таких как моноатом-

ные цепочки на vicинальных поверхностях [6–8]. После того как были впервые получены массивы моноатомных цепочек Co на поверхности Pt (997) [6], исследования электронной структуры таких цепочек (а также моноатомных цепочек железа на поверхности Pt (997) [7]) позволили предположить наличие в металлических цепочках локальных магнитных моментов [8]. Позднее было показано наличие ферромагнитного состояния в моноатомных цепочках Co на поверхности Pt (997) и установлено, что цепочки Co характеризуются большими локализованными орбитальными моментами и, следовательно, величина энергии магнитной анизотропии в таких цепочках значительно выше, чем в случае двумерных пленок или объемного Co [9].

В связи с полученными результатами стали проводиться интенсивные экспериментальные и теоретические исследования возможностей формирования, а также электронных и магнитных свойств различных металлических нанопроводов на vicинальных поверхностях, поскольку такие объекты открывают перспективу создания новых материалов для нужд современной спинтроники. Например, проводились широкие экспериментальные исследования возможностей роста нанопроводов железа на различных поверхностях. В частности, методами сверхвысоковакуумной туннельной микроскопии высокого разрешения доказано существование проводов

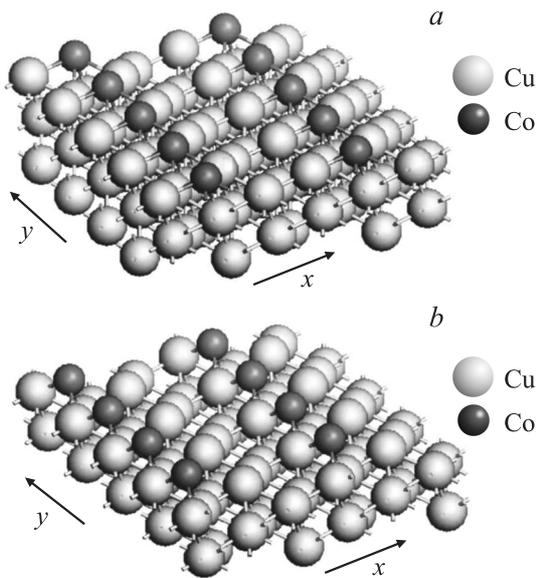
железа на поверхности Au (111) [10]. Изучено влияние нанопроводов железа на этой поверхности на спектр поверхностных электронных состояний [11]. Методом рентгеновского магнитного дихроизма показано увеличение орбитального магнитного момента в одномерных нанопроводах железа на поверхности Au(788), в них обнаружен магнитный фазовый переход от ферромагнитного состояния к суперпарамагнитному [12]. Исследования в сканирующем туннельном микроскопе показали, что Fe-цепочки формируются вдоль ступеней на вицинальной поверхности Pt (997) [7]. Экспериментальное (методом сканирующей туннельной микроскопии) и теоретическое (методом теории функционала электронной плотности) исследования магнитных свойств таких цепочек показали наличие перехода между ферромагнитным и антиферромагнитным состояниями в зависимости от локальной конфигурации атомов железа на поверхности Pt (997) [13]. В рамках расчетов из первых принципов методом теории функционала электронной плотности было изучено влияние подложки на магнитные свойства Fe- и Co-нанопроводов на поверхности Pt (997) [14] и установлено, что спин-орбитальное взаимодействие между атомами системы и гибридизация между их электронными состояниями оказывают влияние на направление осей легкого намагничивания и величину магнитной анизотропии в проводах. Также теоретические исследования методом теории функционала электронной плотности моноатомных проводов железа на поверхностях Cu (11 $n$ ) показали, что железо находится в ферромагнитном состоянии и его температура Кюри лежит между 200 и 300 К [15]. С другой стороны, формирование одномерных проводов возможно не только на вицинальных, но и на анизотропных поверхностях, т.е. на таких, на которых есть выделенные каналы миграции и роста вещества. Экспериментально методом сканирующей туннельной микроскопии были обнаружены моноатомные провода меди на поверхности Pd(110) [16] и кобальта на поверхности Pd(110) [17]. Однако недавние теоретические исследования показали, что происходит погружение атомов Co в верхние слои подложки, при этом на поверхности формируются провода Pd [18]. Теоретические исследования методом теории функционала электронной плотности магнитной анизотропии одномерных цепочек никеля в траншеях на поверхности Au(110)-(1 × 2) показали, что при осаждении на поверхность направление осей легкого намагничивания в проводе меняется с параллельного для свободных цепочек на перпендикулярное цепочкам никеля на поверхности [19].

Совсем недавно было проведено экспериментальное исследование самоорганизационного роста нанопроводов Co на поверхности Cu(210), активированной азотом, выполненное с помощью сканирующего туннельного микроскопа и магнетооптического Керр-эффекта. Это исследование показало возможность образования регулярного массива термически стабильных (даже после десорбции атомов N) нанопроводов Co диаметром

~ 10 nm вдоль направления [001] с сильной магнитной анизотропией в плоскости поверхности [20]. Столь интересный научный результат ставит вопрос о влиянии реконструкции поверхности подложки атомами газа на магнитные свойства Co-нанопроводов.

В связи с этим в настоящей работе методом теории функционала электронной плотности проведено исследование анизотропии магнитных свойств моноатомных нанопроводов Co как на чистой, так и на реконструированной кислородом поверхности Cu(210), структура которой хорошо изучена экспериментально, с учетом спин-орбитального взаимодействия между атомами провода и подложки. Для исследования магнитных свойств нанопроводов Co были проведены расчеты методом *ab initio* молекулярной динамики с помощью теории функционала электронной плотности, которая основана на самосогласованном решении уравнений Кона–Шема [21]. Теоретические расчеты проводились с использованием базиса плоских волн. Обменно-корреляционное взаимодействие и PAW-потенциалы описывались с помощью приближения обобщенных градиентов (GGA) [22]. Динамическая релаксация атомов проводилась до того момента, когда остаточные силы, действующие на ионы системы, становились меньше 0.01 eV/Å. Энергия обрезания базиса плоских волн была равна 500 eV. Расчеты в зоне Бриллюэна осуществлялись в  $k$ -сетке размерности 4 × 8 × 1, построенной методом Монкхорста–Пака [23]. Вычисления проводились с помощью программного пакета VASP (Vienna *ab initio* simulation package) [24]. Расчеты магнитных свойств атомов кобальта проводились с учетом коррекции обменно-корреляционного функционала методом Воско [25]. Используемые параметры расчетной схемы обеспечивают необходимую точность вычислений, что подтверждается проведенными тестовыми расчетами. При расчетах в данной работе диполь-дипольное взаимодействие и анизотропия, связанная с ним, не принимались во внимание, поскольку величина этой анизотропии для случаев низкоразмерных структур, таких как адатомы или нанопровода, значительно ниже величины, связанной со спин-орбитальным взаимодействием [26].

В качестве первого шага было проведено теоретическое исследование особенностей образования и магнитных свойств нанопроводов Co на поверхности Cu(210). Нами были выполнены расчеты атомной структуры и магнитных свойств моноатомного провода Co на поверхности Cu(210), сформированного вдоль направления [001]. Исходя из структуры анизотропной поверхности Cu(210) данное направление может служить каналом роста проводов Co ввиду более высокой подвижности материала вдоль этого направления. Анализ возможных позиций адсорбции вдоль направления [001] и расчет их энергий показали, что атомам Co-провода энергетически выгодно (на 1.04 eV) располагаться в ГЦК-узлах поверхности Cu(210), чем в ГПУ-узлах (рис. 1). По результатам расчетов расстояния между ближайшими атомами кобальта и меди оказались равны  $d_{Co-Cu} = 2.5 \text{ \AA}$

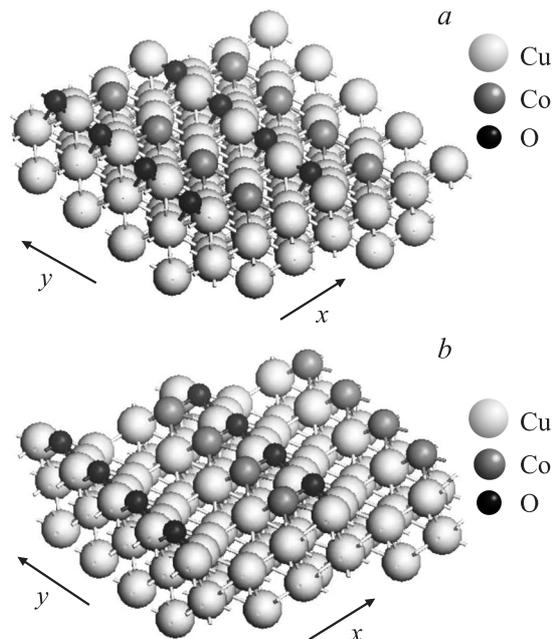


**Рис. 1.** Изображение (вид сбоку) моноатомного провода Co в направлении [001] на поверхности Cu(210) в позиции ГЦК (a) и в позиции ГПУ (b).

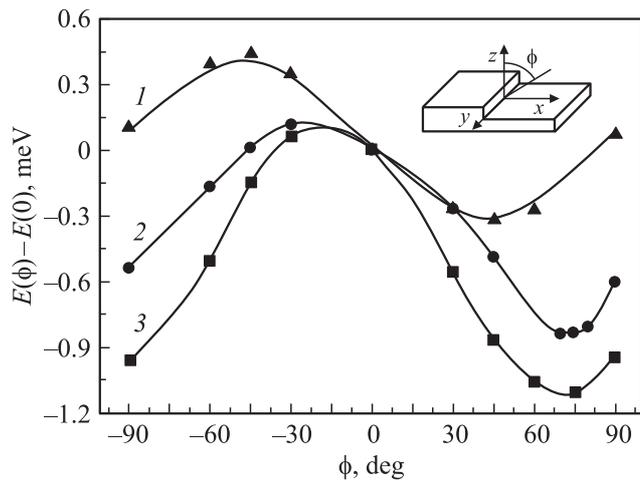
для ГЦК-позиций атомов Co и  $d_{\text{Co-Cu}} = 2.4 \text{ \AA}$  для ГПУ-позиций. Самосогласованный спин-поляризованный расчет электронной структуры Co-провода показал наличие у него магнитных свойств с высоким значением локального магнитного момента  $1.79 \mu_B$  на атом Co в проводе. Поскольку в эксперименте [20] рост нанопроводов Co на начальном этапе происходил в присутствии азота на поверхности Cu(210), было проведено исследование влияния газа на магнитные свойства провода Co на рассматриваемой поверхности Cu(210).

Однако нанесение атомов азота на поверхность может привести к изменению ее структуры, поскольку этот процесс сопровождается реконструкцией поверхности. В частности, возможно погружение атомов азота в поверхностный слой [27]. Структура поверхности меди, реконструированной азотом, может быть очень сложной, как это видно на примере поверхности Cu (110) [27]. Однако, как показали проведенные ранее исследования [28–30], поведение азота на различных поверхностях меди качественно очень схоже с наблюдаемым для поверхностных оксидов переходных металлов. В связи с этим была рассмотрена реконструированная поверхность меди со структурой  $(2 \times 1)\text{O-Cu}(210)$ , экспериментально установленной методом электронной дифракции при нанесении 0.5 монослоя кислорода на поверхность Cu(210) [30]. Данный тип реконструкции поверхности относится к реконструкции „дополнительного ряда“, где атомы кислорода размещаются в положениях моста между ближайшими атомами меди, образуя с ними ряды Cu–O вдоль направления [001] [30]. Особенностью атомной структуры поверхности  $(2 \times 1)\text{O-Cu}(210)$  является наличие глубоких траншей, вдоль которых

могут быть образованы нанопровода Co в направлении [001], как и при нитридации этой поверхности. Рассчитанные расстояния в релаксированной структуре  $(2 \times 1)\text{O-Cu}(210)$  между атомами Cu и O в плоскости поверхности составили  $d_{\text{Cu-O(cal)}} = 0.26 \text{ \AA}$ . Этот результат хорошо согласуется с экспериментом, где данное расстояние составляет  $d_{\text{Cu-O(exp)}} = 0.25 \pm 0.03 \text{ \AA}$ . Однако вертикальная релаксация атома кислорода не совпадает с экспериментом: атомы кислорода образуют ряды на поверхности меди, высота расположения рядов кислорода относительно атомов меди составила  $h_{\text{Cu-O(cal)}} = 0.22 \text{ \AA}$ , в то время как экспериментально получено значение  $h_{\text{Cu-O(exp)}} = 0.07 \pm 0.05 \text{ \AA}$  [30]. Отметим, что изменение параметров расчетной схемы и потенциалов не повлияло на данное значение. Но несмотря на это расхождение, рассчитанные межплоскостные расстояния в медной подложке ( $d_{\text{Cu-Cu(cal)}} = 1.026 \text{ \AA}$ ) совпадают с экспериментально полученными ( $d_{\text{Cu-Cu(exp)}} = 1.03 \pm 0.07 \text{ \AA}$ ). Расчеты энергии адсорбции Co внутри траншей показали, что моноатомным проводам Co выгодно размещаться в глубине траншеи в позиции погруженного в поверхностный слой атомного ряда (позиция ППСАР), а также в позиции ГЦК за счет прямого взаимодействия с атомами кислорода реконструированного слоя (рис. 2), причем позиция ГЦК лишь на  $0.08 \text{ eV}$  энергетически менее выгодна, чем позиция ППСАР. Позиция ГПУ оказалась на  $1.15 \text{ eV}$  энергетически менее выгодной, чем ГЦК. Расстояния в первой координационной сфере между атомами Cu подложки и Co составили  $2.5 \text{ \AA}$  для позиции ППСАР,  $2.4 \text{ \AA}$  для позиции ГЦК и  $2.3 \text{ \AA}$  для позиции ГПУ. Также в первой координационной



**Рис. 2.** Изображение (вид сбоку) моноатомного провода Co в направлении [001] на поверхности  $(2 \times 1)\text{O-Cu}(210)$  в позиции ППСАР (a) и в позиции ГЦК (b).



**Рис. 3.** Зависимость полной энергии  $E(\phi) - E(0)$  от направления намагничивания азимутального угла  $\phi$ , отсчитываемого от оси  $z$  (перпендикулярной поверхности и проводу) в направлении оси  $x$  в плоскости  $xz$  (см. вставку). 1 — Co в позиции ГЦК на чистой поверхности, 2 — Co в позиции ППСАР на реконструированной поверхности, 3 — Co в позиции ГЦК на реконструированной поверхности.

сфере расстояния между атомами Cu и O равны 1.9 Å для позиций ППСАР и ГЦК, между атомами Co и O — 1.8 Å в позиции ГЦК и 1.7 Å в позиции ГПУ. Для рассматриваемых позиций была проведена серия самосогласованных спин-поляризованных расчетов для моноатомных проводов Co, которые показали наличие у них магнитных свойств с высоким значением магнитных моментов порядка 1.81, 1.74 и 1.81  $\mu_B$  для позиций ППСАР, ГЦК и ГПУ соответственно. Эти значения близки к ранее полученному для ГЦК-позиций провода на чистой поверхности Cu(210): 1.79  $\mu_B$ . Результаты расчетов показывают, что локальное окружение атомов Co в проводе слабо влияет на величину магнитного момента; как следствие, можно сделать вывод, что наличие примеси практически не влияет на величину магнитного момента.

В рамках исследования магнитных свойств нанопроводов кобальта на поверхности меди (210) была рассчитана энергия магнитной анизотропии и определены направления осей легкого намагничивания как для чистой поверхности подложки, так и для реконструированной кислородом для энергетически наиболее выгодных позиций атомов кобальта. Зависимость полной энергии системы „провод на подложке“ от направления намагничивания показана на рис. 3. Направление вдоль провода является одной из тяжелых осей. Величина энергии магнитной анизотропии  $E_{MA}$  была оценена в результате аппроксимации полученных зависимостей уравнением  $E(\phi) - E(0) = C - E_{MA} \cos^2(\phi + \phi_{min})$ , где  $\phi_{min}$  — угол, соответствующий минимуму энергии и направлению оси легкого намагничивания. Аппроксимирующие кривые также показаны на рис. 3. В табл. 1 обобщены

результаты расчетов магнитных свойств атомов Co в различных позициях на чистой и реконструированной кислородом поверхностях Cu(210). Получено, что для случая ГЦК-позиции реконструкция поверхности кислородом приводит к увеличению  $E_{MA}$  от 0.75 meV для чистой поверхности до 1.24 meV для поверхности Cu(210) с нанесенными атомами кислорода. Таким образом, из табл. 1 видно, что присутствие газа (атомов кислорода) на поверхности Cu(210) может привести к увеличению энергии магнитной анизотропии, а также к изменению направления осей легкого и тяжелого намагничивания, при этом значения магнитного момента остаются близкими. Эти результаты косвенно согласуются с экспериментальными данными по нитридации поверхности Cu(210) [20].

Величина  $E_{MA}$  может быть оценена с помощью модели Бруно [7]. В рамках этой модели величина энергии магнитной анизотропии  $E_{MA} = \epsilon/4\mu_B [M_{L(easy)} - M_{L(hard)}]$ , где  $\epsilon$  — константа спин-орбитального взаимодействия. В частности, ранее проведенные в работе [31] исследования для монослоя кобальта на поверхности меди показали линейную зависимость энергии магнитной анизотропии от разности проекций орбитального магнитного момента на оси легкого и тяжелого намагничивания. При этом максимальная величина энергии магнитной анизотропии для данной системы составила порядка 0.7 meV [31], а величина проекции орбитального углового момента на направление оси легкого намагничивания

**Таблица 1.** Магнитные свойства нанопроводов Co на поверхности Cu(210)

Позиция атома Co	$E_{MA}$ , meV	$\phi_{easy}$ , deg	$\phi_{hard}$ , deg	$M_s$ , $\mu_B$
Чистая поверхность Cu(210)				
ГЦК	~ 0.75	~ 45	~ -45	1.79
Поверхность Cu(210), реконструированная кислородом				
ГЦК	~ 1.24	~ 75	~ -30	1.74
ППСАР	~ 0.95	~ 70	~ -30	1.81

Примечание.  $\phi_{easy}$ ,  $\phi_{hard}$  — азимутальные углы с направлениями оси легкого и тяжелого намагничивания соответственно,  $M_s$  — величина локального магнитного момента.

**Таблица 2.** Значения проекций угловых орбитальных моментов  $M_L$  на легкую и тяжелую оси намагничивания для различных положений Co-нанопроводов на чистой и реконструированной поверхности Cu(210)

Позиция атома Co	$M_{L(easy)}$ , $\mu_B$	$M_{L(hard)}$ , $\mu_B$
Чистая поверхность Cu(210)		
ГЦК	0.26	0.22
Поверхность Cu(210), реконструированная кислородом		
ГЦК	0.19	0.13
ППСАР	0.26	0.21

доминировала над его проекцией на направление оси тяжелого намагничивания. Аналогичные результаты получены и в настоящей работе. В табл. 2 представлены рассчитанные значения проекций угловых орбитальных моментов на легкую ( $M_{L(\text{easy})}$ ) и тяжелую ( $M_{L(\text{hard})}$ ) оси намагничивания. Полученные значения величин проекций орбитального углового момента  $M_L$  и спинового магнитного момента  $M_s$  сопоставимы по величине с найденными экспериментально методом рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма для монослоев кобальта на поверхности Cu(001): для 3 монослоев кобальта  $M_L = 0.21 \pm 0.05 \mu_B$  и  $M_s = 1.75 \pm 0.10 \mu_B$ , а для 2.1 монослоя  $M_L = 0.24 \pm 0.05 \mu_B$  и  $M_s = 1.77 \pm 0.10 \mu_B$  [32]. Полученные значения проекций орбитального момента связаны линейно с энергией магнитной анизотропии, при этом величина  $M_{L(\text{easy})}$  доминирует над величиной  $M_{L(\text{hard})}$ , что соответствует модели Бруно. Следует отметить, что константа спин-орбитального взаимодействия  $\epsilon$  различна в случае ГЦК-позиций на чистой и реконструированной кислородом поверхности Cu(210), поскольку на реконструированной поверхности в первой координационной сфере атома Co в нанопроводе присутствует атом кислорода. Однако для случая позиции ППСАР величина  $\epsilon$  должна быть близка к ее значению на чистой поверхности, поскольку атомов кислорода в первой координационной сфере атомов кобальта нет.

Анализ парциальных плотностей  $d$ -состояний атома Co на чистой и реконструированной кислородом поверхности Cu(210) (рис. 4) показал, что после реконструкции поверхности меди кислородом произошло перераспределение плотностей  $d$ -состояний кобальта по сравнению с аналогичными состояниями кобальта на чистой поверхности Cu(210), при этом основной вклад в плотность состояний вблизи энергии Ферми вносят состояния со спином вниз. С помощью теории возмущений второго порядка показано, что на значение энергии основного состояния влияет величина спин-орбитального взаимодействия между свободными и занятыми энергетическими состояниями вблизи энергии Ферми. Вблизи энергии Ферми после реконструкции поверхности наблюдается увеличение значения плотности  $d_{xz}$ -состояний и уменьшение плотности  $d_{x^2-y^2}$ -состояний, плотности состояний остальных  $d$ -орбиталей практически не изменяются. Подобное перераспределение плотностей состояний оказывает влияние на величину спин-орбитального взаимодействия между ними, поскольку является причиной изменения матричных элементов этого взаимодействия. Таким образом, это перераспределение локальных плотностей состояний является причиной изменения величины энергии магнитной анизотропии и направления осей легкого и тяжелого намагничивания.

В настоящей работе установлено, что провода Co на поверхности Cu(210) обладают высокими значениями магнитных моментов и в них наблюдается магнитная анизотропия. Показано, что кислород оказывает существенное влияние на магнитные свойства нанопроводов, выращенных на поверхности меди Cu(210). Получено,

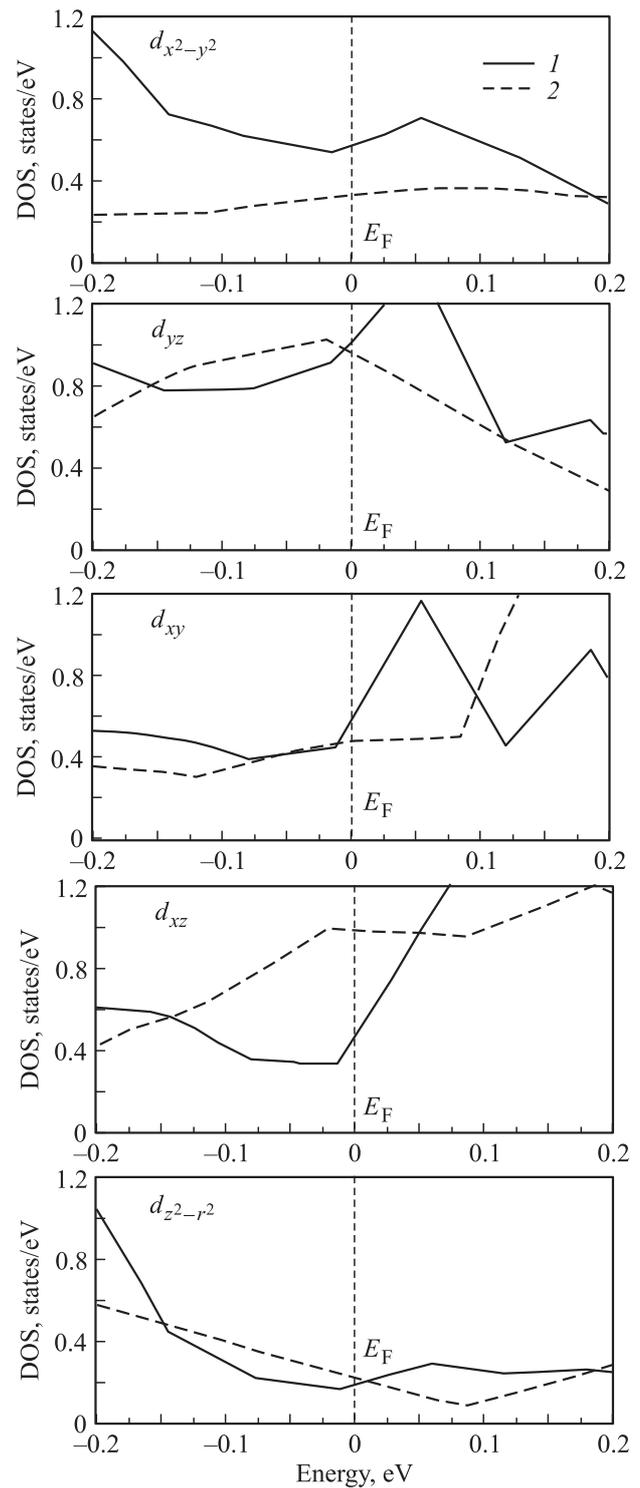


Рис. 4. Парциальные плотности электронных состояний со спином вниз  $d$ -орбиталей атома Co относительно уровня Ферми на чистой (1) и реконструированной (2) поверхности Cu(210).

что в случае проводов Co на поверхности Cu(210) реконструкция поверхности кислородом приводит к увеличению энергии магнитной анизотропии ( $\sim 1.24$  meV для позиции ГЦК), в то время как значения магнитно-

го момента остаются высокими и близки к значению для чистой поверхности Cu(210). После реконструкции поверхности кислородом произошло изменение направления оси легкого намагничивания по отношению к чистым поверхностям. Полученные результаты косвенно совпадают с экспериментальными данными по нитридации поверхности Cu(210) [20]. Обнаруженные эффекты перераспределения парциальных плотностей состояний  $d$ -орбиталей атомов провода могут служить косвенным объяснением экспериментального факта изменения магнитных свойств нанопровода кобальта после нитридации поверхности подложки Cu(210).

## Список литературы

- [1] D.M. Eigler, E.K. Schweizer. *Nature* **344**, 524 (1990).
- [2] H.J. Elmers, J. Hauschild, H. Hoche, U. Gradmann, H. Bethge, D. Heuer, U. Köhler. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 898 (1994).
- [3] J. Shen, R. Skomski, M. Klaua, H. Jenniches, S. Sundar Manoharan, J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **56**, 2340 (1997).
- [4] J. Hauschild, H. J. Elmers, U. Gradmann. *Phys. Rev. B* **57**, R677 (1998).
- [5] M. Pratzner, H.J. Elmers, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, R. Wiesendanger. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 127 201 (2001).
- [6] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Ebezhazdt, K. Kern, C. Carbone. *Nature* **416**, 301 (2002).
- [7] R. Cheng, E. Ayieta, Ya.B. Losovyij. *J. Vac. Sci. Technol. A* **26**, 4, 673 (2008).
- [8] P. Gambardella, M. Blanc, L. Burgi, K. Kuhnke, K. Kern. *Surf. Sci.* **449**, 93 (2000).
- [9] P. Gambardella, M. Blanc, K. Kuhnke, K. Kern. *Phys. Rev. B* **61**, 2254 (2000).
- [10] W.C. Lin, H.-Y. Chang, Y.-Y. Lin, Y.-C. Hu. *J. Appl. Phys.* **107**, 014 301 (2010).
- [11] S. Shivaki, H. Fujisawa, M. Nanton, M. Kawai. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 9, 096 102 (2004).
- [12] S. Shivaki, H. Fujisawa, T. Nakamuro, N. Muro, M. Nantoh, M. Kawai. *Phys. Rev. B* **78**, 115 428 (2008).
- [13] J. Honolka, T.Y. Lee, K. Kuhnke, D. Repetto, V. Sessi, P. Wahl, A. Buchsbaum, P. Varga, S. Gardonio, C. Carbone, S.R. Krishnakumar, P. Gambardella, M. Komelj, R. Singer, M. Fähnle, K. Fauth, G. Schütz, A. Enders, K. Kern. *Phys. Rev. B* **79**, 104 430 (2009).
- [14] M. Komelj, P. Steiauf, M. Fahnle. *Phys. Rev. B* **73**, 134 428 (2006).
- [15] D. Spisak, J. Hafner. *Comp. Mater. Sci.* **27**, 138 (2003).
- [16] E. Hahn, E. Kampshoff, A. Fricke, J.-P. Butcher, K. Kern. *Surf. Sci.* **319**, 277 (1994).
- [17] L. Yan, M. Przybylski, Y. Lu, W.H. Wang, J. Barthel, J. Kirschner. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 102 503 (2005).
- [18] O. Stepanyuk, N. Negulyaev, P. Ignatiev, M. Przybylski, W. Hergert, A. Saletsky, J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **79**, 155 410 (2009).
- [19] W. Fan, X.-G. Gong. *Surf. Rev. Lett.* **15**, 5, 567 (2008).
- [20] H. Xu, X. Gao, Y.Y. Sun, A.T.S. Wee. *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, 2106 (2006).
- [21] W. Kohn. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
- [22] P.E. Blöchl. *Phys. Rev. B* **50**, 17 953 (1994).
- [23] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- [24] G. Kresse, J. Furthmüller. *Phys. Rev. B* **54**, 11 169 (1996).
- [25] S.H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair. *Can. J. Phys.* **58**, 1200 (1980).
- [26] H.J.G. Draaisma, W.J.M. de Jonge. *J. Appl. Phys.* **64**, 7, 3610 (1988); F. Munoz, J. Mejia-Lopez, T. Perez-Acle, A.H. Romero. *ACS Nano* **4**, 5, 2883 (2010).
- [27] X.-D. Ma, D.I. Bazhanov, O. Fruchart, F. Yildiz, T. Yokoyama, M. Przybylski, V.S. Stepanyuk, W. Hergert, J. Kirschner. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 205 503 (2009).
- [28] A. Soon, L. Wong, M. Lee, M. Todorova. *Surf. Sci.* **601**, 4775 (2007).
- [29] A. Soon, L. Wong, B. Delley, C. Stampfl. *Phys. Rev. B* **77**, 125 423 (2008).
- [30] Y.P. Guo, K.C. Tan, H.Q. Wang, C.H.A. Huan, A.T.S. Wee. *Phys. Rev. B* **66**, 165 410 (2002).
- [31] T.S. Dasa, P.A. Ignatiev, V.S. Stepanyuk. *Phys. Rev. B* **85**, 205 447 (2012).
- [32] T. Nakagawa, Y. Takagi, Y. Matsumoto, T. Yokoyama. *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 4, 2132 (2008).