

08,10

Кластеры Ni_3 на поверхности $\text{Pb}(111)$: атомная релаксация и фононы

© Г.Г. Русина, С.Д. Борисова

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН,
Томск, Россия

E-mail: rusina@ispms.ru, svbor@ispms.ru

Поступила в Редакцию 11 июня 2026 г.

В окончательной редакции 23 июня 2026 г.

Принята к публикации 23 июня 2026 г.

Для более глубокого понимания процесса формирования упорядоченных кластерных структур на поверхности металлов исследована роль атомной релаксации и фононной подсистемы в стабильности поверхностной кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$. Все расчеты проводились с использованием межатомных потенциалов, сгенерированных в рамках метода погруженного атома.

Ключевые слова: двумерная поверхностная сверхструктура, адсорбированные кластеры, атомная релаксация, локальная плотность фононных состояний.

DOI: 10.61011/FTT.2026.08.63679.10074

1. Введение

В последние годы, благодаря развитию современных технологий, появился класс новых материалов, основанных на соединениях ферромагнетик/сверхпроводник или сверхпроводник/ферромагнетик [1–6]. При прямом контакте ферромагнетика и сверхпроводника проявление эффекта близости и обменного взаимодействия способствует возникновению сверхпроводящих свойств в ферромагнетике, которые демонстрируют когерентность в пределах определенного конечного расстояния [7]. Это многообещающий подход к искусственной стабилизации сверхпроводимости в широком диапазоне низкоразмерных материалов. Например, топологическая сверхпроводимость с p -волновым спариванием может содержать новый тип возбуждения квазичастиц, которое достигается путем управления взаимодействием между ферромагнетиком и сверхпроводящим материалом с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Эти возбужденные квазичастицы могут быть строительными блоками для кубитов, используемых в квантовых вычислениях и спинтронике [8,9]. Реализация такой схемы возможна на краях магнитных nanoостровков (кластеров), осаждаемых на поверхность тяжелых p -элементов [10]. Экспериментально обнаруженная структура $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$ [2] является одним из примеров формирования упорядоченной кластерной структуры в системе ферромагнетик/сверхпроводник. В работе [2] было показано, что данная структура обладает сверхпроводящими свойствами и температура сверхпроводящего перехода в никеле сопоставима с температурой перехода свинца. В работе также обсуждаются результаты *ab initio* расчета параметров электрон-фононного взаимодействия, которыми определяется сверхпроводимость. Динамика решетки

рассчитывалась в рамках теории функционала плотности (DFPT, Density Functional Perturbation Theory), реализованной в коде Quantum-Espresso [11]. Полученные значения средней логарифмической частоты фононов и коэффициента электрон-фононной связи использовались при определении температуры сверхпроводящего перехода. Уникальность данной структуры состоит в кардинальном отличии от типичного механизма формирования двумерных поверхностных структур на плотноупакованной поверхности (111) ГЦК-металлов. Многочисленными структурными исследованиями было установлено, что при субмонослойных степенях адсорбции на поверхности (111) ГЦК-металлов формируется серия упорядоченных двумерных сверхструктур [4,12]. Однако в работе [2] было показано, что при степенях адсорбции ≤ 0.4 монослоя (МС) атомы никеля не формируют упорядоченные двумерные сверхструктуры. Особенно это нехарактерно для степени адсорбции 0.33 МС, при которой на поверхности (111) большинства ГЦК-металлов адатомы формируют сверхструктуру $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [12]. Упорядоченная сверхструктура $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$ была обнаружена только при степени покрытия поверхности подложки 0.44 МС и состояла из трехатомных кластеров никеля. Островковый характер формирования поверхностных сверхструктур на поверхности (111) ГЦК-металлов наблюдался также при субмонослойном покрытии Fe на $\text{Pb}(111)$ [6].

Целью настоящей работы является теоретическое исследование особенностей формирования стабильных поверхностных кластерных сверхструктур в системе ферромагнетик/сверхпроводник на примере системы $\text{Ni}/\text{Pb}(111)$, а также определение роли структурных и динамических характеристик в этом процессе.

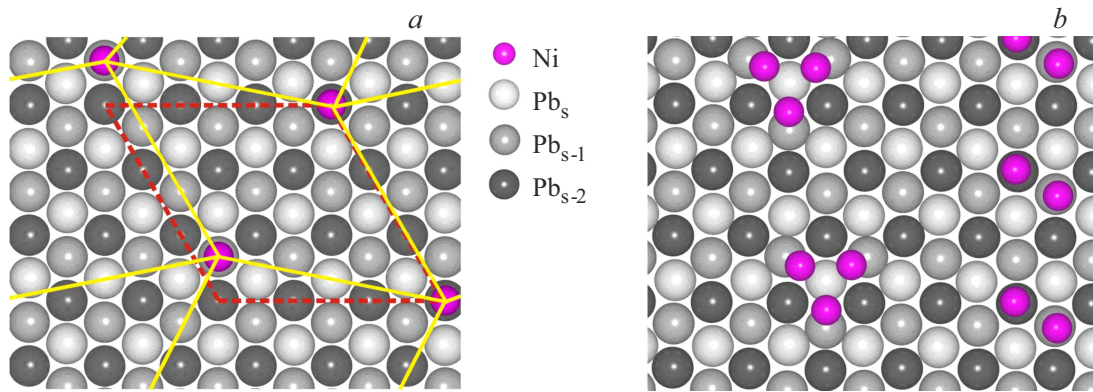


Рис. 1. Модели субмонослойных поверхностных структур в системе Ni/Pb(111) при 0.11 (a) и 0.33 (b) МС. Элементарная ячейка домена с упорядоченной структурой (3 × 3) (желтая линия), развернута на 19.1° относительно элементарной ячейки структуры (3 × 3) ГЦК-подложки (красная штриховая линия).

2. Метод и детали расчета

В используемом методе погруженного атома (МПА) потенциальная энергия имеет вид [13]

$$E = 1/2 \sum_{ij} \varphi(r_{ij}) + \sum_i F_i \left[\sum_{j \neq i} \rho_j^a(r_{ij}) \right] \quad (1)$$

и включает $\varphi(r_{ij})$ — парный потенциал взаимодействия атомов i и j , расположенных на расстоянии r_{ij} , а также функцию погружения F_i , заданную в узле r_i и описывающую многочастичные взаимодействия. Функция F_i определяется электронной зарядовой плотностью ρ_j^a , являющейся суперпозицией атомных плотностей в узле r_j . Зарядовая плотность ρ_j^a получается из решения задачи для свободного атома в приближении функционала локальной плотности [14]. Генерируемые в настоящей работе потенциалы учитывают взаимодействия атомов до пятой координационной сферы включительно. Параметры метода подгоняются под экспериментальные данные для Ni и Pb по равновесному объему, энергии образования вакансии, модулю всестороннего сжатия и модулю упругости. Парный потенциал имеет вид экранированного кулоновского потенциала и для описания взаимодействия разных элементов используется в форме [15]

$$\varphi_{AB}(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{\rho_B(r)}{\rho_A(r)} \varphi_A(r) + \frac{\rho_A(r)}{\rho_B(r)} \varphi_B(r) \right], \quad (2)$$

где $\varphi_A(r)$, $\rho_A(r)$ и $\varphi_B(r)$, $\rho_B(r)$ — парные потенциалы и атомные плотности Ni и Pb.

Равновесную геометрию поверхностных структур определяли методом молекулярной динамики при температуре $T = 0$ по минимуму полной энергии всей системы, точность расчета которой составляла 10^{-4} eV. Поверхность моделировалась тонкой пленкой с геометрией поверхности (111) свинца, на верхний слой пленки наносились одиночный кластер Ni₃ или кластеры Ni₃ в сверхструктуре $(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1$. Общее

количество атомов в расчетной ячейке при оптимизации структуры составило 3080 атома, при этом двенадцать нижних атомных слоев являлись статичными. На систему накладывались периодические граничные условия в плоскости поверхности. Для демпфирования скоростей использовалась схема Верлета [16], с временным шагом $h = 1 \cdot 10^{-12}$ s.

3. Результаты и обсуждение

На первом этапе была рассчитана релаксация чистой поверхности Pb(111), которая для трех поверхностных слоев составила $\Delta_{12} = -2.3\%$, $\Delta_{23} = +0.2\%$ и $\Delta_{34} = -0.1\%$, что соответствует данным расчета в рамках теории функционала плотности DFT $\Delta_{12} = -4.7\%$, $\Delta_{23} = +1.5\%$ и $\Delta_{34} = +0.44\%$ [17] и эксперимента по дифракции медленных электронов (LEED) $\Delta_{12} = -(3.5 \pm 1)\%$, $\Delta_{23} = +(0.5 \pm 1.4)\%$ и $\Delta_{34} = +(1.6 \pm 1.8)\%$ [18]. Далее были смоделированы возможные двумерные структуры при субмонослойной адсорбции никеля (≤ 0.3 МС) на поверхности Pb(111). На рис. 1, a, b приведены модели возможных поверхностных структур из атомов Ni при субмонослойных степенях адсорбции.

Как видно из рис. 1, a, при степени адсорбции 0.11 МС после релаксации всей системы два атома Ni оказываются в ГПУ-положениях и два атома Ni — в ГЦК положениях адсорбции. Общая картина адсорбции представляется доменами двух типов, развернутыми относительно друг друга на $\sim 20^\circ$. Разница в расстояниях атомов Ni от поверхности подложки приводит к формированию структурного гофра, как в доменах, так и в поверхностном слое подложки. Увеличение покрытия до 0.25 МС приводит к релаксационному разупорядочиванию адсорбционной структуры. При степени адсорбции 0.33 МС после релаксации всей системы начинается кластеризация осажденных атомов никеля с формированием трехатомных кластеров Ni₃, которые разделены

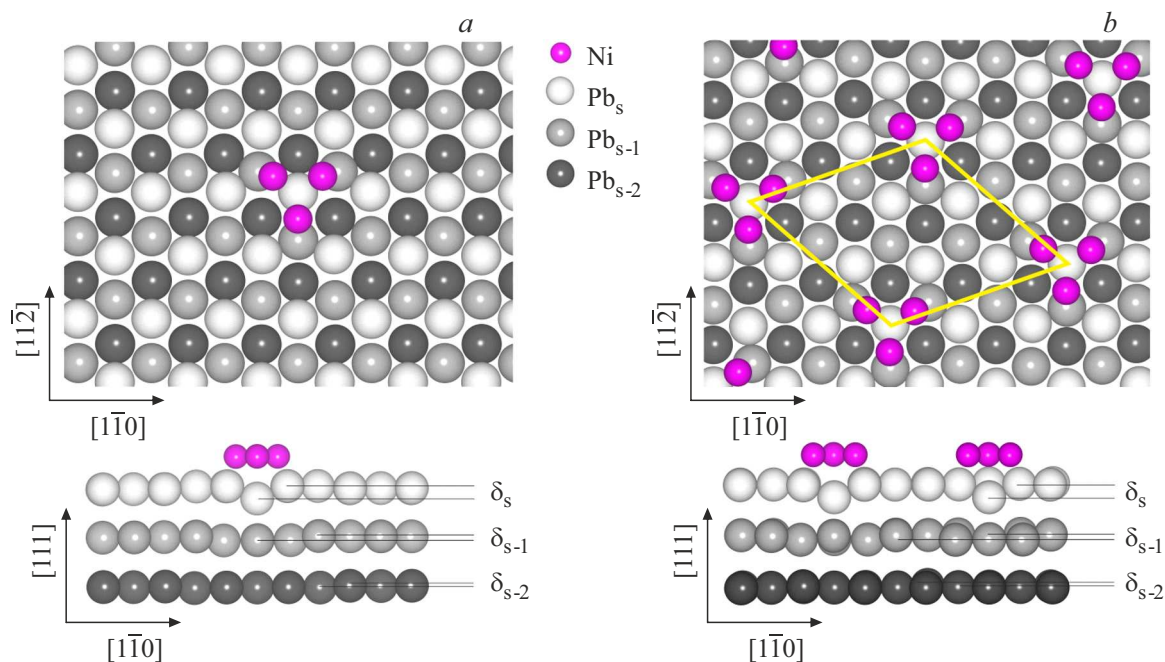


Рис. 2. Геометрические модели одиночного кластера Ni_3 (*a*) и кластерной структуры $Ni_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ$ (*b*) на поверхности $Pb(111)$: вид сверху (верхняя панель) и сбоку (нижняя панель).

двумя рядами атомов никеля. Трехатомная кластеризация атомов Ni на поверхности $Pb(111)$ обусловлена характером межатомного взаимодействия и симметрией поверхности (111) . Так рассчитанные значения энергии связи для димеров $Ni-Ni$, $Pb-Ni$ и $Pb-Pb$ составили 1.98, 1.59 и 1.22 эВ, соответственно. При этом атомы кластера Ni_3 располагаются в смещенных ГЦК-положениях адсорбции, а одиночные атомы Ni — в ГЦК- и ГПУ-положениях (см. рис. 1, *b*).

Упорядоченная адсорбционная структура $Ni_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-Pb(111)$, состоящая из взаимодействующих кластеров Ni_3 , формируется при степени адсорбции 0.44 МС, что соответствует насыщенному монослою. Для понимания процесса формирования данной структуры, было исследовано влияние релаксации и динамических параметров для двух моделей кластерной структуры. Первая модель предполагает отсутствие взаимодействия между кластерами и рассматривается как одиночный кластер Ni_3 . Вторая модель представляется структурой $Ni_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-Pb(111)$ с учетом взаимодействия кластеров. На рис. 2, *a, b* приведены геометрические модели рассматриваемых структур. После релаксации системы расстояние между атомами в кластерах Ni_3 на поверхности $Pb(111)$ для обеих рассматриваемых моделей составило 2.4 Å, что приблизительно на 5% превышает значение для свободного кластера Ni_3 . Из рис. 2, *a* видно, что в первую группу атомов подложки, ближайших к кластеру Ni_3 , входит один атом с поверхностного слоя подложки Pb_{1s} , расположенный под центром кластера

Таблица 1. Вертикальная релаксация Δ_{ij} трех верхних слоев подложки $Pb(111)$ в присутствии одиночного кластера Ni_3 и структуры $Ni_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-Pb(111)$; h_{Ni-Pb} — вертикальное расстояние до ближайшего атома Pb_{1s} с поверхностного слоя

Группа ближайших атомов	h_{Ni-Pb} , Å	Δ_{12} , %	Δ_{23} , %	Δ_{34} , %
$Ni_3/Pb(111)$				
Pb_{1s}	2.39	−15.5	−4.4	−0.7
Pb_{6s}		1.6	4.2	−1.6
Pb_s		−2.9	0.3	0.3
$Ni_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-Pb(111)$				
Pb_{1s}	2.40	−15.1	−3.9	−0.2
Pb_{6s}		2.1	4.8	−1.0
Pb_s		1.3	5.5	−0.04

на расстоянии 2.76 Å. Во вторую группу ближайших атомов входят шесть атомов с поверхностного слоя подложки Pb_{6s} находящихся на расстоянии 2.9 Å от атомов кластера. Третью группу составляют остальные ближайшие атомы с поверхностного слоя подложки Pb_s .

В табл. 1 приведены значения вертикальной релаксации для трех групп ближайших атомов подложки в трех приповерхностных слоях. Сравнение величин вертикальной релаксации рассмотренных систем и чистой поверхности $Pb(111)$ показало, что, как и в статье [2], адсорбция кластера Ni_3 приводит к сильному

Таблица 2. Величина гофра δ_{s-n} (Å) для шести ближайших к поверхности плоскостей подложки в присутствии одиночного кластера $\text{Ni}_3/\text{Pb}(111)$ и кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$

Поверхностная структура	δ_s	δ_{s-1}	δ_{s-2}	δ_{s-3}	δ_{s-4}	δ_{s-5}
$\text{Ni}_3/\text{Pb}(111)$	0.699	0.223	0.070	0.040	0.021	0.012
$\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$	0.726	0.264	0.105	0.029	0.013	0.001

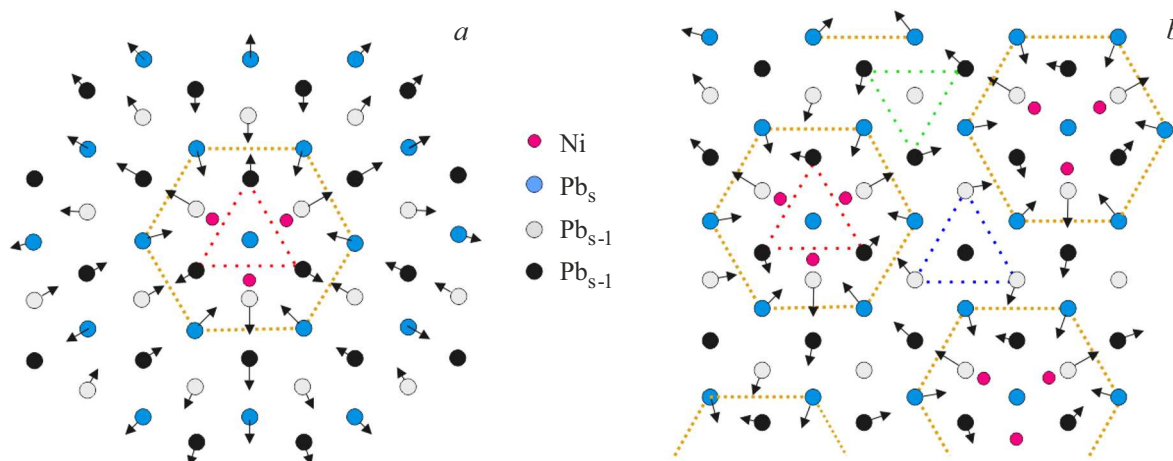


Рис. 3. Латеральные смещения одиночного кластера Ni_3 (а) и кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ$ на поверхности $\text{Pb}(111)$ (b).

смещению вглубь подложки атома Pb_{1s} . Это оказывает существенное влияние на вертикальную и латеральную релаксацию ближайших к поверхности слоев подложки, формируя структурный гофр не только в поверхностном слое подложки, но и в нижележащих слоях. В табл. 2 приведены значения величины гофра, которые становятся пренебрежимо малыми лишь в шестом подповерхностном слое.

На рис. 3,а схематично представлены латеральные смещения ближайших атомов подложки к одиночному кластеру Ni_3 . Эти смещения являются симметричными и реализовываются по тройкам. Такой характер смещений присущ всем группам ближайших атомов подложки, расположенных в поверхностных слоях Pb_s , Pb_{s-1} и Pb_{s-2} .

Для кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$ на рис. 3,б представлены латеральные смещения ближайших атомов подложки вокруг каждого кластера. Из рисунка видно, что в слое Pb_s атомы подложки смещаются симметрично по направлению к кластеру, в то время как в слоях подложки Pb_{s-1} и Pb_{s-2} формируются структурные домены с антифазными ротационными смещениями атомов. Данный результат согласуется с экспериментальными данными [2,19] относительно наличия доменных стенок в подложке между кластерами. Расчеты всех релаксационных смещений атомов подложки показали, что адсорбция одиночного кластера Ni_3 и формирование двумерной кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ$ приводят

к появлению локальных деформаций структуры вокруг каждого кластера. Что, в свою очередь, приводит к изменению межатомных взаимодействий и отражается на динамических характеристиках всей системы.

Для расчетов фононной структуры была использована модель тонкой пленки толщиной 19 атомных слоев, соответствующих поверхности $\text{Pb}(111)$, с двумерной элементарной ячейкой (7×7) . Количество атомов, входящих в расчетную ячейку, составляло 937 для одиночного кластера Ni_3 и 973 для структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$. Элементарной ячейке (7×7) соответствует двумерная зона Бриллюэна (ЗБ), которая в 49 раз меньше ЗБ исходной ячейки (1×1) (см. вставку на рис 4, b). Это приводит к многократным отражениям дисперсионных кривых в центр ЗБ (точка $\bar{\Gamma}$), а также в симметричные точки $\bar{K}''$ и $\bar{M}''$ новой ЗБ. Плотность дисперсионных кривых в фононном спектре кратно возрастает, что затрудняет выявление колебательных состояний, обусловленных взаимодействием кластеров Ni_3 с поверхностью $\text{Pb}(111)$. Поэтому для описания новых локализованных фононных состояний были проведены расчеты локальной плотности фононных состояний (LDOS, local density of states) для рассматриваемых систем, которую определяли проекцией собственных значений на атомы Ni или Pb в направлениях X, Y или Z. Собственные значения частот колебаний и векторов поляризации колебательных мод рассчитывали методом динамической матрицы. Для свободных

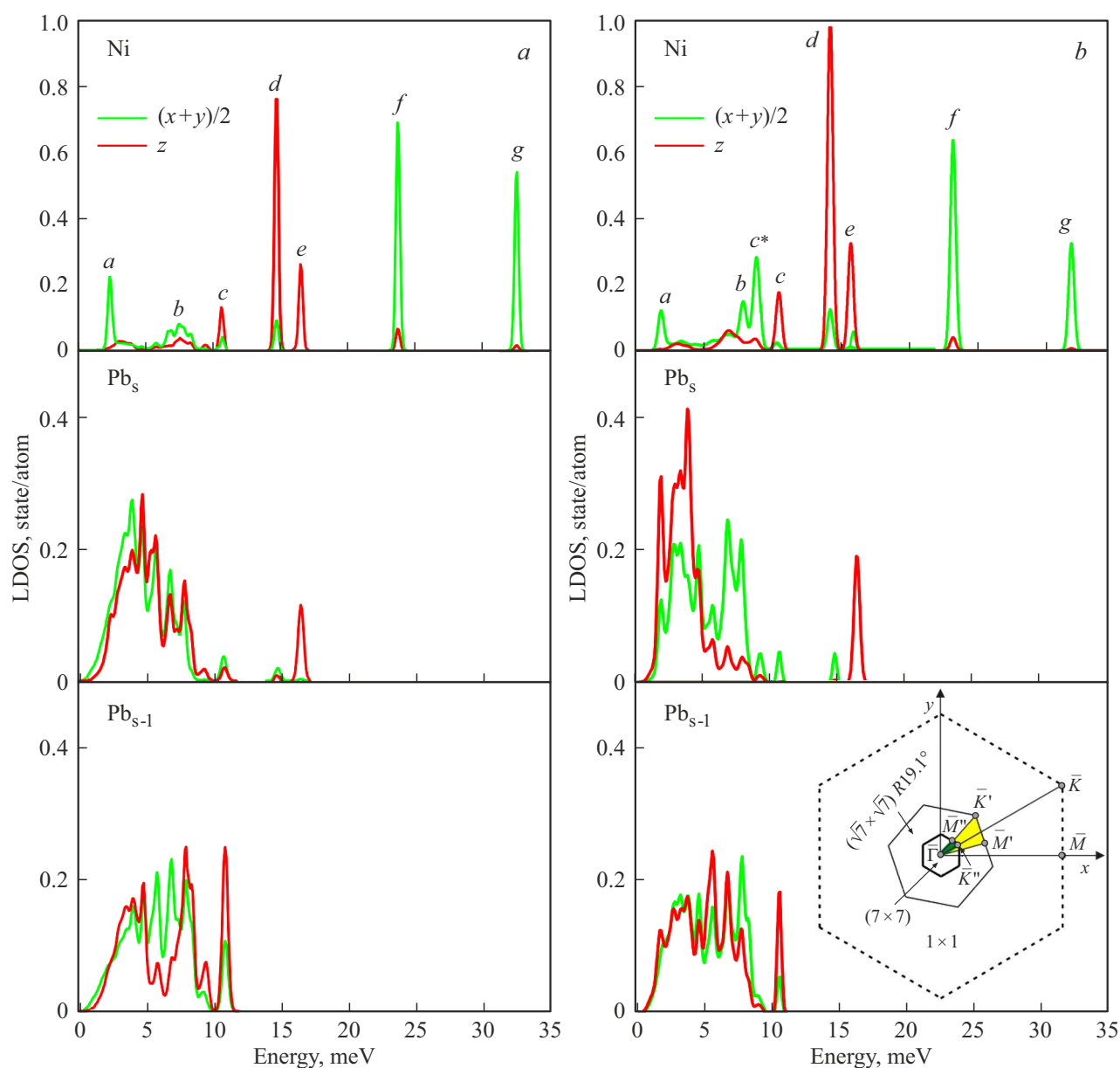


Рис. 4. Локальные плотности фоновых состояний для одиночного кластера Ni_3 на $\text{Pb}(111)$ (a), кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$ (b), а также слоев подложки Pb_s и Pb_{s-1} . На вставке представлена двумерная ЗБ.

кластеров Ni_3 в форме равностороннего треугольника из девяти степеней свободы лишь три соответствуют колебательным модам: высокочастотная симметричная мода с энергией 41.4 meV, а также дважды вырожденная мода при энергии 29.7 meV, характеризующаяся деформационными и антисимметричными колебаниями [20–22]. Эти три моды собственных колебаний кластера являлись ориентиром для определения колебательных мод, связанных с взаимодействием с подложкой.

На рисунках 4, a и 5, a–g приведены данные относительно LDOS и вектора поляризации локализованных колебательных мод для системы $\text{Ni}_3/\text{Pb}(111)$ с одиночным кластером. Характерной особенностью динамического поведения осажденного кластера Ni_3 является

наличие низкочастотных поворотных мод колебаний при энергиях 2.3 meV (пик a) и 7.5 meV (пик b). Эти моды обусловлены взаимодействием адатомов, имеющих поляризацию колебаний $YX \gg Z$, с деформационными смещениями ближайших атомов, расположенных в слоях подложки Pb_{s-1} и Pb_s . Пики c, d, e в LDOS соответствуют деформационным колебаниям Ni_3 , которые смешиваются с колебаниями вдоль оси Z ближайших атомов в слоях подложки Pb_s и Pb_{s-1} . В пик c вносят вклад два вырожденных состояния, обозначенных на рис. 5 как c1 и c2. Отличаются эти состояния разным характером поляризации (антисимметричным и симметричным) колебаний атомов кластера вдоль направления Z. Как видно из рис. 4, a, пик d формируют состояния с

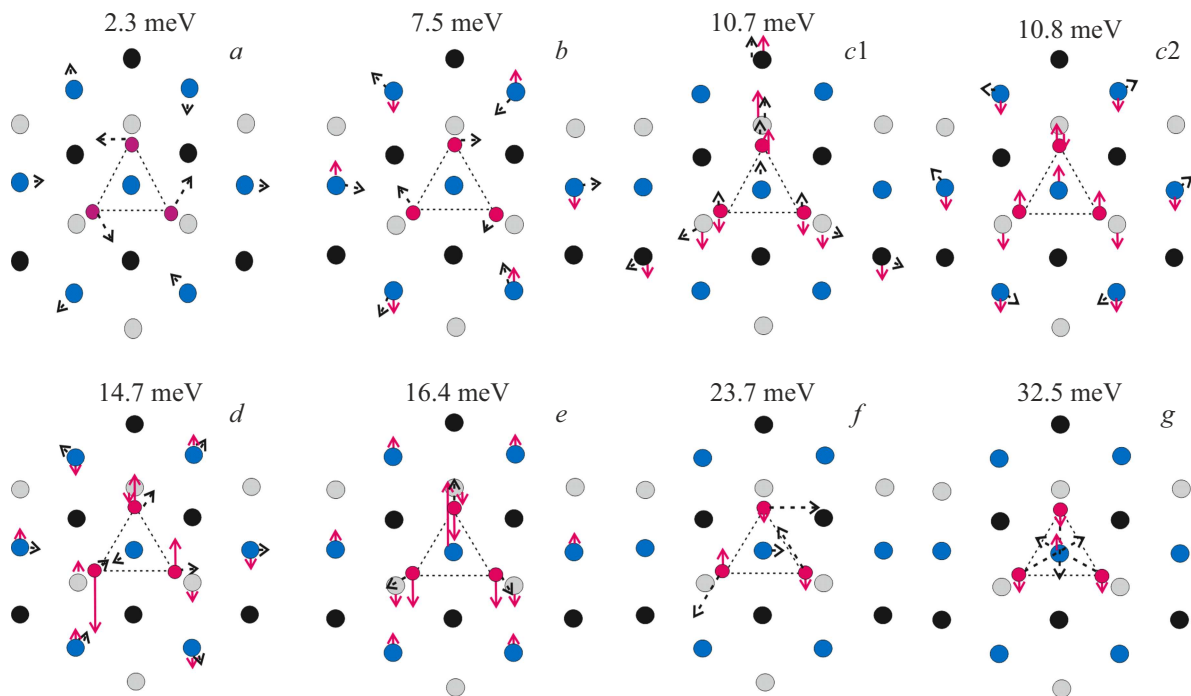


Рис. 5. Векторы поляризации и энергия локализованных колебательных мод в соответствии с обозначениями пиков (a–g) на рис. 4, a для одиночного кластера Ni_3 на поверхности $\text{Pb}(111)$. Длина стрелок соответствует амплитудам параллельных и перпендикулярных компонент векторов смещения. Сплошные красные стрелки соответствуют Z-компоненте смещений атомов, пунктирные черные стрелки отображают XY-компоненту.

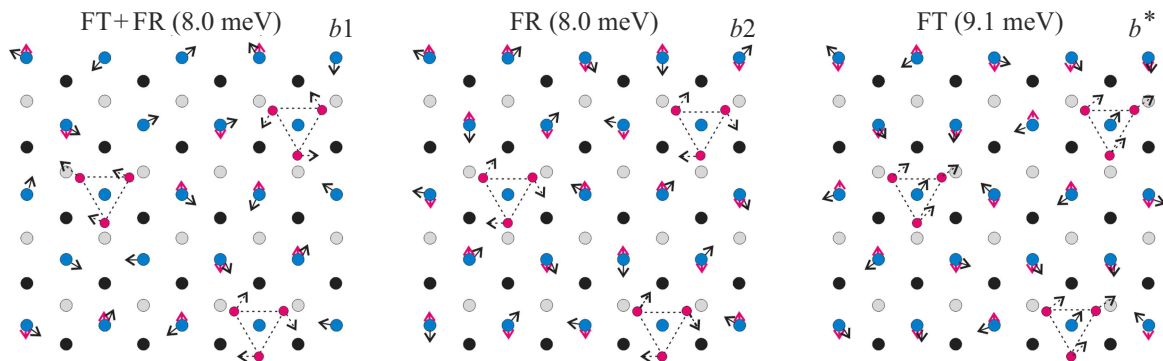


Рис. 6. Векторы поляризации и энергия новых колебательных мод (пики b_1 , b_2 , b^* на рис. 4, b) для кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$. Все обозначения такие же, как на рис. 5.

максимальной локализацией Z-колебаний на атомах кластера, а пик e определяется совместными Z-колебаниями кластера и ближайших атомов подложки из слоя Pb_s . Колебательные моды (пики f и g), отвечающие собственным колебаниям свободного кластера, обнаруживаются при значительно более низких энергиях, но характер их поляризации не изменяется.

При формировании кластерной структуры все локализованные моды одиночного кластера сохраняются, и лишь в низкочастотной области появляются три новых колебательных состояния с поворотными и трансляционными смещениями. На рис. 6 показаны векторы

поляризации данных состояний. В LDOS пику b соответствуют два вырожденных состояния, которые определяются смещениями атомов всех кластеров в слое: совместными поворотными (FR, frustrated rotation) и трансляционными (FT, frustrated translation) смещениями (рис. 6, пик b_1), а также синфазными поворотными смещениями всех кластеров как единого целого (рис. 6, пик b_2). Эти колебательные состояния максимально гибридованы с деформационными колебаниями поверхностных атомов подложки, что отражает динамическую стабильность кластерной структуры. Для кластерной структуры $\text{Ni}_3-(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ-\text{Pb}(111)$ характерно

появление в низкочастотной области фононного спектра FT-колебаний при энергии 9.1 meV, которые отсутствуют в случае одиночного кластера Ni_3 .

При осаждении кластеров Ni_3 на поверхность $Pb(111)$ наиболее заметные изменения в колебательном спектре подложки происходят при формировании кластерной структуры. Наблюдается частотный сдвиг вертикальных и продольных колебаний ближайших к кластерам атомов подложки: первые смещаются в низкочастотную область фононного спектра, вторые — в высокочастотную область (см. рис. 4, *a, b*). При этом энергии Z-поляризованных мод колебаний атомов в слоях Pb_s и Pb_{s-1} , сформированных еще при адсорбции одиночного кластера, остаются неизменными и составляют 10.8 и 16.4 meV. Эти моды не характерны для чистой поверхности $Pb(111)$ и являются результатом взаимодействия с атомами Ni.

4. Заключение

В рамках МПА проведен теоретический анализ структурных изменений и изменения динамических характеристик в формирование двумерных поверхностных структур в системе Ni/Pb. Показано, что уже при субмонослойных степенях адсорбции наблюдается тенденция к кластеризации атомов Ni, обусловленная соотношением энергий связи взаимодействующих элементов и симметрией поверхности подложки. При формировании кластерной структуры $Ni(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ$ – $Pb(111)$ значительный вклад вносят релаксационные эффекты, связанные с антифазными ротационными смещениями атомов кластера и ближайших атомов подложки в трех поверхностных слоях, а также формированием между кластерами стенок антифазных доменов, с разворотом на $R19.1^\circ$. Появление колебательных FT- и FR-мод в фононной структуре $Ni(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ$ – $Pb(111)$ приводит к усилению локализации всех колебательных мод и частотному сдвигу фононных состояний поверхностного слоя подложки: низкочастотному сдвигу вертикальных колебаний и высокочастотному сдвигу продольных колебаний.

Таким образом, проведенные расчеты релаксационных и динамических характеристик позволяют лучше понять процесс формирования двумерной кластерной структуры $Ni(\sqrt{7} \times \sqrt{7})R19.1^\circ$ – $Pb(111)$, наблюдаемой в эксперименте методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2026-0008.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] P.B. Buzdin. Rev. Mod. Phys., **77**, 935 (2005).
- [2] Y.-H. Lin, S. Teh, T.-Y. Yeh, C.-H. Chen, D.-S. Lin, H.-T. Jeng, and P.-J. Hsu. Phys. Rev. Mater. **6**, 046002 (2022).
- [3] Y.-H. Lin, C.-H. Hsu, I. Jang, C.-J. Chen, P.-M. Chiu, D.-S. Lin, C.-T. Wu, F.-C. Chuang, P.-Y. Chang, and P.-J. Hsu. ACS Appl. Mater. Interfaces **14**, 20, 23990 (2022).
- [4] S.D. Borisova, S.V. Ereemeev, E.V. Chulkov, G.G. Rusina. Phys. Chem. Chem. Phys. **26**, 16184 (2024).
- [5] С.Д. Борисова, Г.Г. Русина. ФММ **124**, 5, 377 (2023).
- [6] J. Li, T. Neupert, Z. Wang, A.H. MacDonald, A. Yazdani, B.A. Bernevig. Nat. Commun. **7**, 12297 (2016).
- [7] J. Jiang, W. Zhao, F. Wang, R. Du, L. Miao, K. Wang, Q. Li, C.Z. Chang, M.H.W. Chan. Phys. Rev. Res. **4**, 023133 (2022).
- [8] M. Eschrig. Rep. Prog. Phys. **78**, 10, 104501 (2015).
- [9] D. Aasen, M. Hell, R.V. Mishmash, A. Higginbotham, J. Danon, M. Leijnse, T.S. Jespersen, J.A. Folk, C.M. Marcus, K. Flensberg, J. Alicea. Phys. Rev. X **6**, 031016 (2016).
- [10] A. Palacio-Morales, E. Mascot, S. Coclin, H. Kim, S. Rachel, D.K. Morr, R. Wesendanger. Sci. Adv. **5**, 6600 (2019).
- [11] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo. J. Phys. Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
- [12] R.D. Diehl, R. McGrath. Surf. Sci. Rep. **23**, 43 (1996).
- [13] S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw. Phys. Rev. B **33**, 7983 (1986).
- [14] L. Hedin, B.I. Lundqvist. J. Phys. C **4**, 2064 (1971).
- [15] R.A. Johnson. Phys. Rev. B **39**, 12554 (1989).
- [16] L. Verlet. Phys. Rev. **159**, 98 (1967).
- [17] I.Yu. Sklyadneva, R. Heid, K.-P. Bohnen, P.M. Echenique, E.V. Chulkov. J. Phys. Condens. Matter **24**, 104004 (2012).
- [18] Y.S. Li, F. Jona, P.M. Marcus. Phys. Rev. B **43**, 6337 (1991).
- [19] C. Drechsel, P. D'Astolfo, J.-C. Liu, T. Glatzel, R. Pawlak, E. Meyer. Beilstein J. Nanotechnol. **13**, 1 (2022).
- [20] С.Д. Борисова, Г.Г. Русина. Физическая мезомеханика. **26**, 100 (2023).
- [21] M. Castro, C. Jamorski, D.R. Salahub. Chem. Phys. Lett. **271**, 133 (1997).
- [22] E.M. Nour, C. Alfaro-Franco, K.A. Gingerich, J. Laane. J. Chem. Phys. **86**, 4779 (1987).

Редактор Е.Ю. Флегонтова