

КЛАСТЕРЫ РЬ НА ПОВЕРХНОСТИ АІ (001): РАВНОВЕСНАЯ СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

© 2021 г. С. Д. Борисова^а, *, Г. Г. Русина^а

^аИнститут физики прочности и материаловедения СО РАН, пр. Академический, 2/4, Томск, 634055 Россия

*e-mail: svbor@ispms.tsc.ru

Поступила в редакцию 23.03.2021 г.

После доработки 16.07.2021 г.

Принята к публикации 19.07.2021 г.

Исследовано влияние атомной конфигурации и размеров кластеров РЬ, адсорбированных на поверхность АІ (001), на их динамическую стабильность. Выявлена слабая степень гибридизации колебательных мод чистой поверхности подложки с дипольными колебательными модами адкластеров, что свидетельствует о метастабильном состоянии адсорбционной системы. Показано, что объемная атомная конфигурация кластеров является динамически наиболее стабильной. Расчеты структурной релаксации, энергии колебательных мод и локальной плотности колебательных состояний в системе РЬ/АІ (001) проводили с использованием межатомных потенциалов, сконструированных в рамках метода погруженного атома.

Ключевые слова: поверхность, релаксация, фононы, кластеры

DOI: 10.31857/S0015323021110048

ВВЕДЕНИЕ

Свойствами адсорбированных кластеров определяются многие процессы, протекающие на поверхности твердого тела, такие как ее реактивность, поверхностная диффузия, рост тонких пленок и др. [1]. Например, в процессах роста эпитаксиальных пленок, кластеры из адатомов часто играют центральную роль. В большинстве случаев они определяют структуру пленки и границы раздела, так как являются центрами для конгломерации осаждаемых атомов [2].

Система РЬ/АІ активно используется в качестве модельной при исследовании механизмов формирования структуры и свойств тонких пленок и границы раздела между твердыми фазами. Это обусловлено как экстремально низкой взаимной растворимостью в твердом состоянии, так и величиной несоразмерности их параметров решетки ($a_{\text{РЬ}} = 4.95 \text{ \AA}$, $a_{\text{АІ}} = 4.02 \text{ \AA}$) [3]. Экспериментальные и теоретические структурные исследования [4, 5] показали, что при степени покрытия $\Theta = 0.5$ МС РЬ на поверхности АІ (001) формируется упорядоченная, динамически стабильная структура РЬ – с(2 × 2). Однако изменение плотности осаждаемых атомов может приводить к смене механизма роста пленки (например, с послойного роста на островковый или наоборот) [4–6]. Для устойчивого роста пленки, помимо структурных факторов, имеет значение динамическое поведение взаимодействующих элементов. При этом

ключевым моментом является определение плотности низкоэнергетических колебательных мод, ассоциируемых с флуктуациями около связи адатом-подложка, поскольку именно они выступают в качестве колебательного прекурсора поверхностной миграции адатомов [2, 7–9].

Известно, что миграционная и десорбционная устойчивость кластера на подложке определяется, соответственно, трансляционными и дипольно-активными колебательными модами [7–9]. В работе [8] на примере адкластеров Со, было показано, что реализация миграционного или десорбционного механизма потери динамической устойчивости кластера на поверхности подложки определяется соотношением энергий возбуждения этих фундаментальных мод. Что касается динамических характеристик РЬ, осаждаемого на металлические поверхности, то были проведены теоретические оценки избыточной энергии колебаний и конфигурационной энтропии сформированного устойчивого интерфейса [10–12]. В работах [6, 9] было теоретически исследовано влияние “смачивающего” монослоя свинца на динамическую стабильность интерфейса в системах РЬ/АІ и РЬ/Сu. Однако динамические характеристики начальных этапов формирования интерфейса были исследованы недостаточно. Структурные исследования показали, что на начальном этапе осаждения РЬ на поверхность (001) многих ГЦК-металлов формируются квазипериодические структуры из

изолированных кластеров Pb, имеющие элементарные ячейки с большим базисом [4, 5, 13]. Углового разрешения экспериментальных методов, используемых для определения дисперсионных кривых, недостаточно для полного описания такой структуры [14]. Расчеты из первых принципов (*ab initio*), как правило, позволяют получить информацию о колебательных модах лишь в центре ЗБ [15]. Кроме того, они требуют больших временных и компьютерных затрат. Такой подход не позволяет иметь полное представление о динамической устойчивости структуры вдоль симметричных направлений ЗБ и на ее границе. Исходя из этих условий, полагаем, что для системы “кластер Pb_n/поверхность Al (100)” более эффективным будет использование модельных расчетов, которые ранее успешно применяли в исследованиях поверхностей с адатомами [6, 7, 9, 16].

В настоящей работе проведено теоретическое исследование влияния размеров и атомной конфигурации кластеров Pb на динамическую стабильность системы Pb_n/Al (100). Были проведены расчеты равновесных атомных конфигураций кластеров и структуры подложки. Рассчитаны векторы поляризации и плотности локализованных колебательных состояний.

МЕТОД РАСЧЕТА

Расчет равновесной кристаллической структуры и колебательных свойств системы Pb_n/Al (001) проводили с использованием ЕАМ-потенциалов, полученных в приближении погруженного атома (ЕАМ-embedded atom method), с радиусом обрезания на пятой координационной сфере [17]. Этот метод широко применяется при исследованиях колебательных свойств чистых поверхностей металлов и поверхностей с адсорбатами [6, 9, 16]. Оптимизацию структуры проводили при нулевой температуре методом молекулярной динамики одновременно для всей системы. Для определения скорости движения атомов была использована скоростная схема Верлета с шагом по времени $\tau = 10^{-14}$ с [18]. Поверхность моделировали тонкой пленкой состоящей из 31 атомного слоя Al (001), на противоположные стороны которой наносили атомы кластера Pb. Расчет частот колебаний и векторов поляризации проводили методом динамической матрицы. Плотность колебательных состояний рассчитывали стандартным методом тетраэдров, модифицированным применительно к двумерной зоне Бриллюэна (метод треугольника) [19]. Атомы кластеров Pb, имеющих плоскую и объемную конфигурации, располагали над 4-х центровыми пукстатами поверхности Al (100) на обеих сторонах пленки. Размерность плоского кластера Pb равнялась 4 и 9 атомам, а объемного – 5 и 14 атомам. Исходная длина связи атомов Pb составляла

2.84 Å. Для создания эффекта изолированности кластеров двумерную элементарную ячейку выбирали размерностью (6 × 6). Количество атомов, входящих в расчетную ячейку, варьировали от 1124 до 1144 атомов, в зависимости от размера кластера Pb.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА. ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 и 2 показана исходная структура и схема релаксационных смещений поверхностных атомов Al (100) и атомов кластеров Pb_n ($n = 4, 5, 9, 14$). Проведенные расчеты показали, что релаксация приводит к выраженным латеральным смещениям атомов кластера от его центра масс, с увеличением длин связи. В Pb₄ такое увеличение составило 0.51 Å, в Pb₉ – 0.97 Å для боковых и 0.91 Å для угловых атомов кластера. Аналогичное увеличение длины связи на 0.54 Å характерно для атомов, лежащих в основании объемного кластера Pb₅. В соответствии с геометрией кластера Pb₁₄ (9 атомов в основании, 4 атома во втором слое и 1 вершинный атом) длина связи $R_{\text{Pb-Pb}}$ также максимально выросла для атомов, лежащих в основании пирамиды (боковые на 1.06 Å и угловые на 0.95 Å).

Равновесное расстояние для всех атомов кластера Pb₄ до поверхностного слоя подложки составило $h_z = 2.17$ Å. Что касается кластера Pb₉, его атомная конфигурация после релаксации имеет выпуклую форму (см. рис. 1г). Это приводит к различным расстояниям h_z до поверхностного слоя подложки: 2.16 Å для центрального атома, 2.30 и 2.39 Å, соответственно для боковых и угловых атомов. Поверхностные атомы подложки, расположенные под кластером, могут быть представлены тремя группами: Al_{NN-4} взаимодействуют с 4 атомами Pb, Al_{NN-2} взаимодействуют с 2 атомами Pb и Al_{NN-1} взаимодействуют с 1 атомом Pb. Релаксация приводит к увеличению латеральных длин связи (~2%) для всех описанных групп атомов подложки. Вертикальная релаксация подложки имеет знакопеременный характер, эти данные представлены в табл. 1. Схемы описанных релаксационных смещений для обоих кластеров и подложки приведены на рис. 1б, 1г. Разная величина взаимодействия атомов кластера с атомами подложки групп Al_{NN-4}, Al_{NN-2} и Al_{NN-1} приводит к короблению поверхностных слоев подложки. При адсорбции кластеров свинца, независимо от их конфигурации, максимальное значение коробления структуры наблюдается в поверхностном слое подложки. Увеличение размера плоского кластера от Pb₄ до Pb₉ приводит к росту величины коробления от 0.25 до 0.37 Å. Для подповерхностного слоя подложки увеличение размера кластера приводит

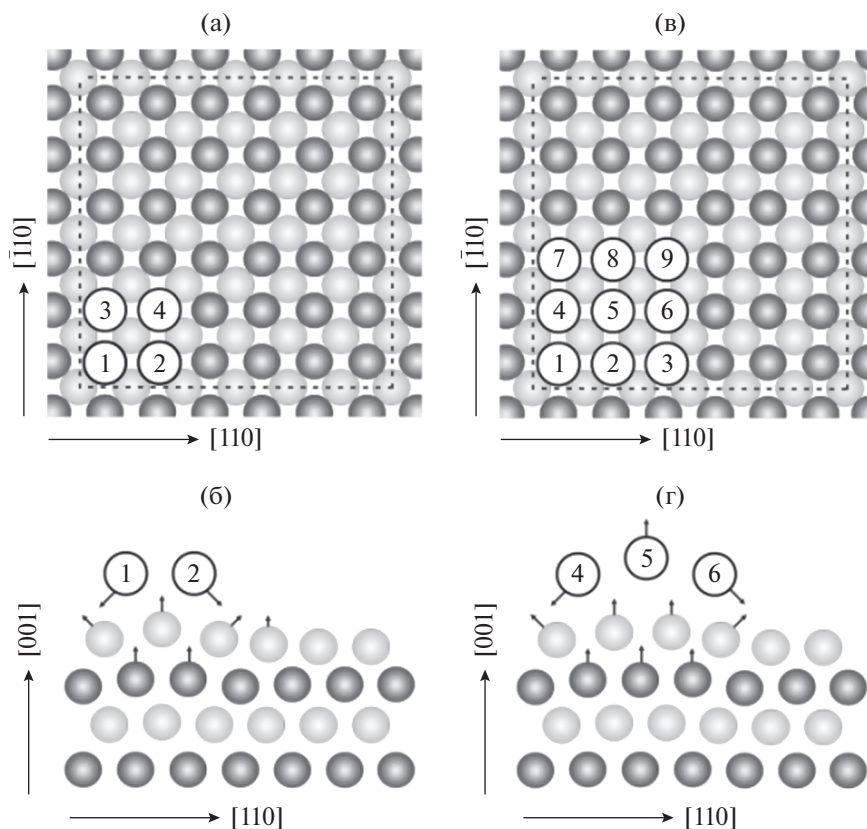


Рис. 1. Исходная геометрия адсорбированных плоских кластеров Pb_n ($n = 4, 9$). Расчетная ячейка (6×6) показана пунктиром (а, в); схемы релаксационных смещений поверхностных атомов Al и кластеров Pb_n (б, г). Темно-серые кружки – атомы Al поверхностного S-слоя, светло-серые кружки – атомы Al подповерхностного слоя (S – 1), белые кружки с цифрами – атомы Pb.

к значительному росту величины коробления (от 0.09 до 0.29 Å).

Переход к объемной атомной конфигурации приводит в Pb_5 к сокращению расстояния до поверхности подложки на 7% для всех атомов, лежащих в основании кластера. В Pb_{14} расстояние от центрального атома в основании пирамиды до ближайших атомов подложки сокращается на 2.2%, а для боковых и угловых атомов основания

это расстояние увеличивается на 1.2%. Для данного кластера сохраняется куполообразная форма основания. Перепад высот между угловыми (7, 9, 1, 3) и боковыми (6, 8, 2, 4) атомами составляет $\Delta h_z = 0.15$ Å. Латеральная релаксация подложки сохраняет знакопеременный характер. В плоскости поверхности для атомов, расположенных под центром и углами кластера, R_{Al-Al} возрастает на 7.2 и 2.25% соответственно. Направления релак-

Таблица 1. Изменение межслоевых расстояний Δ_{ij} (%) в системе $Pb_n/Al(001)$. Знаки “–” и “+” указывают на их сокращение или увеличение относительно объемного значения

$Pb_n/Al(001)$	$\Delta_{12}, \%$			$\Delta_{23}, \%$		
	Al_{NN-4}	Al_{NN-2}	Al_{NN-1}	Al_{NN-4}	Al_{NN-2}	Al_{NN-1}
Pb_4	+4.6	–3.1	–7.9	+1.6	+2.2	+2.6
Pb_5	+6.1	–3.2	–8.4	+1.7	+2.3	+2.7
Pb_9	– 2.1 (ц.) +7.9 (угл.)	–7.8 (угл.)	–10.4	+7.6 (ц.) 2.4 (угл.)	+5.1 (угл.)	+2.1
Pb_{14}	– 2.9 (ц.) +8.3 (угл.)	–8.2 (угл.)	–10.3	+8.4 (ц.) –2.8 (угл.)	+5.2 (угл.)	+2.1

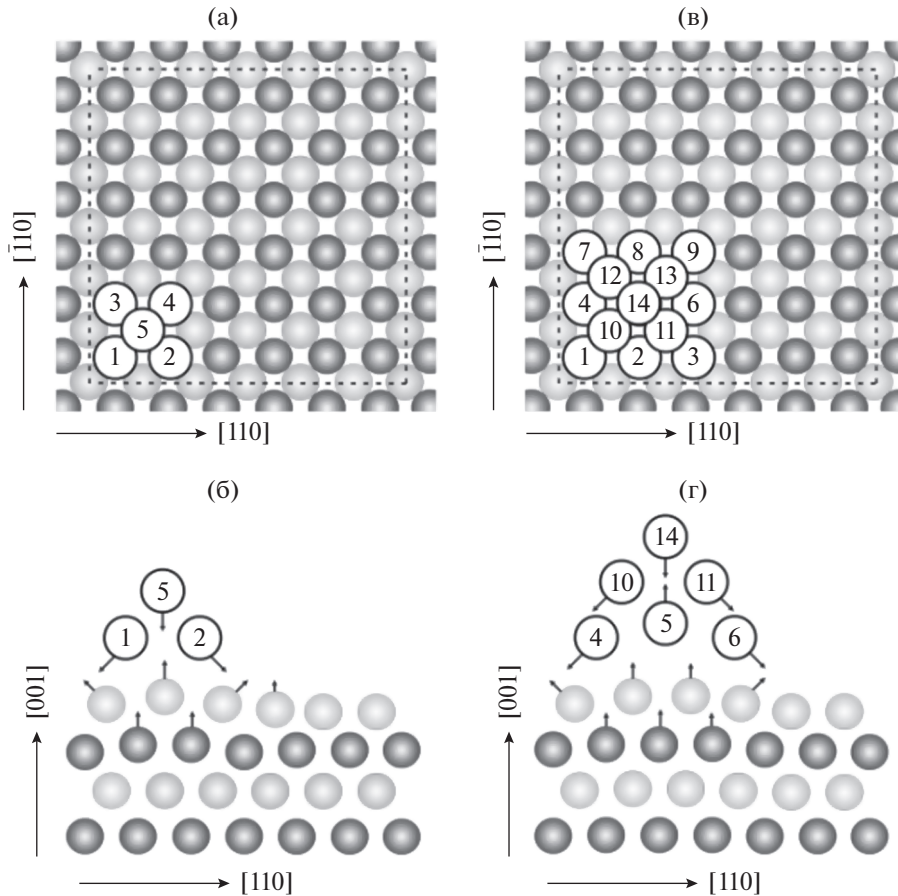


Рис. 2. Исходная геометрия адсорбированных объемных кластеров Pb_n ($n = 5, 14$) (а, в); расчетная ячейка (6×6) показана пунктиром. Схемы релаксационных смещений поверхностных атомов Al и кластеров Pb_n (б, г). Темно-серые кружки – атомы Al поверхностного S-слоя, светло-серые кружки – атомы Al подповерхностного слоя (S – 1), белые кружки с цифрами – атомы Pb.

сационных смещений для объемных кластеров и подложки приведены на рис. 2б, 2г, а величина вертикальной релаксации приведена в табл. 1. Как видно из рис. 2г и табл. 1, атомы подложки, лежащие под центральной и боковой частями кластеров, имеют разный знак вертикальной релаксации.

Таблица 2. Энергия колебаний и поляризация (в скобках) фоновых мод поверхности Al(001) в симметричных точках ЗБ. S – поверхностный слой с максимальной локализацией фоновых состояний

Энергия (мэВ) и поляризация колебательных мод			
\bar{X}			
DFT [20]	12.3 (XY)s	17.1 (Z)s	33.5 (X)s
Эксп. [21]	----	15.1 (Z)s	----
EAM	11.2 (XY)s	14.5 (Z)s	28.2 (X)s
\bar{M}			
DFT [20]	21 (XY)s	----	----
EAM	22 (XY)s	17.8 (Z)s	24 (X)s

Таким образом, анализ структурной релаксации показал, что равновесная геометрия плоского кластера, с увеличением его размерности, приобретает куполообразную форму, что отражает тенденцию к формированию островковой конфигурации. Для объемного кластера эта тенденция сохраняется и наиболее ярко проявляется в характере релаксации подложки под кластером.

Для проверки адекватности потенциалов, используемых для расчета колебательных характеристик системы $Pb_n/Al(001)$, было проведено сравнение с *ab initio* и экспериментальными значениями энергии фоновых мод чистых поверхностей взаимодействующих элементов [15, 20, 21]. В табл. 2 приведены значения энергии локализованных колебательных мод в симметричных точках двумерной ЗБ для поверхности Al(100). Как видно из таблицы, полученные значения энергии локализованных мод и их поляризация согласуются с *ab initio* расчетами и экспериментом.

Рассчитанные энергии колебательных мод для чистой поверхности Pb также находятся в хоро-

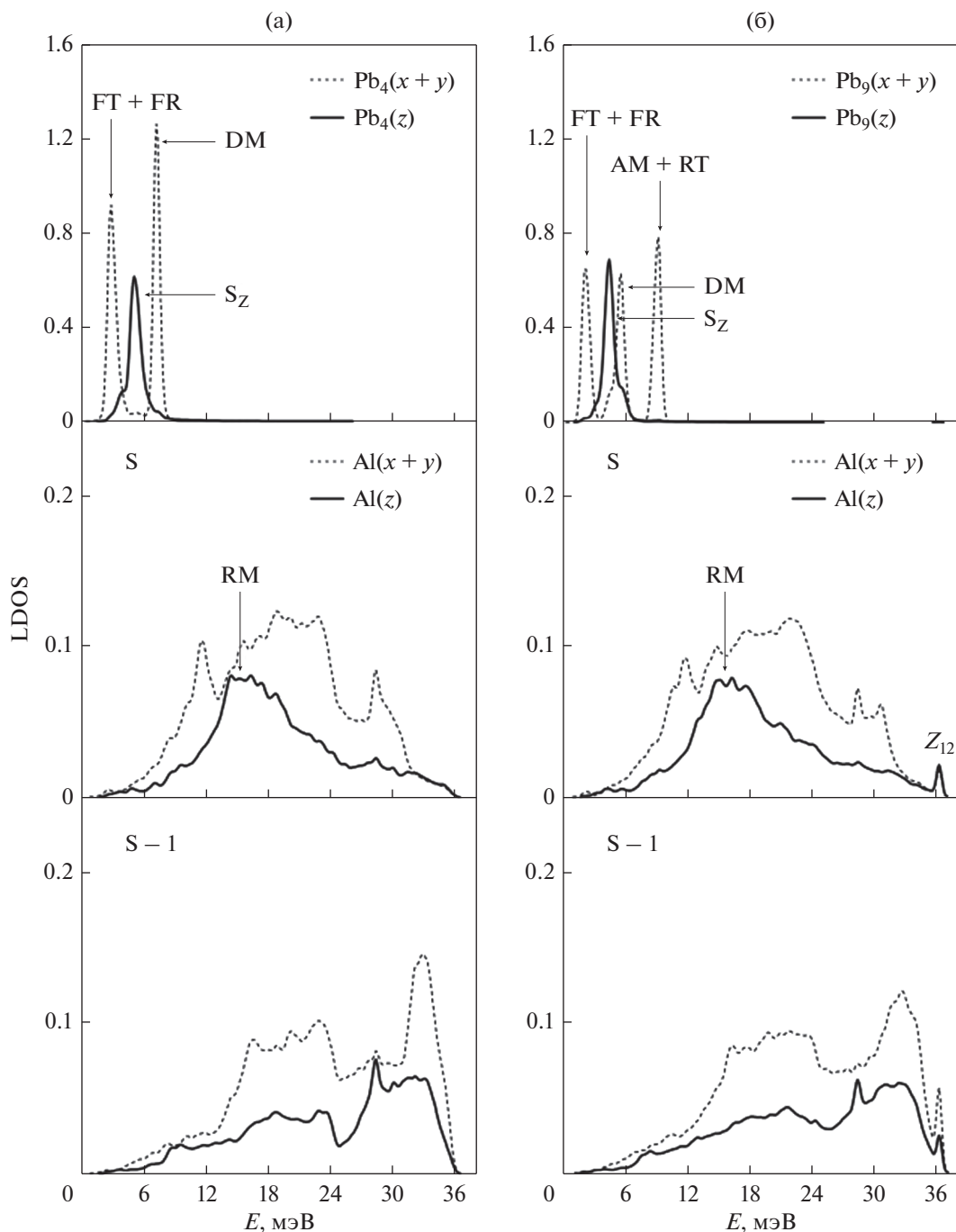


Рис. 3. Распределение локальной плотности состояний (LDOS) в системе $Pb_n/Al(001)$ ($n = 4, 9$): (а) $Pb_4/Al(001)$; (б) $Pb_9/Al(001)$. S, S – 1 – поверхностный и подповерхностный слой Al (001).

шем согласии с *ab initio* расчетом [15, 22] и экспериментом [10, 14]. Так для поверхности Pb (111) энергия рэлеевской моды в точке \bar{K} двумерной зоны Бриллюэна равна 5.2 (EAM), 5.3 (*ab initio*) и 5.4 мэВ (эксперимент). Такое же согласие наблюдается в точке \bar{M} для всех локализованных колебательных мод.

При адсорбции кластера его колебательные свойства определяются трансляционной и поворотной модами (XY -поляризация), а также дипольно-активной модой, поляризованной строго перпендикулярно поверхности (Z -поляризация). На рис. 3, 4 представлены плотности колебательных состояний, локализованных на кластерах свинца и подложке. Локализованные пики соот-

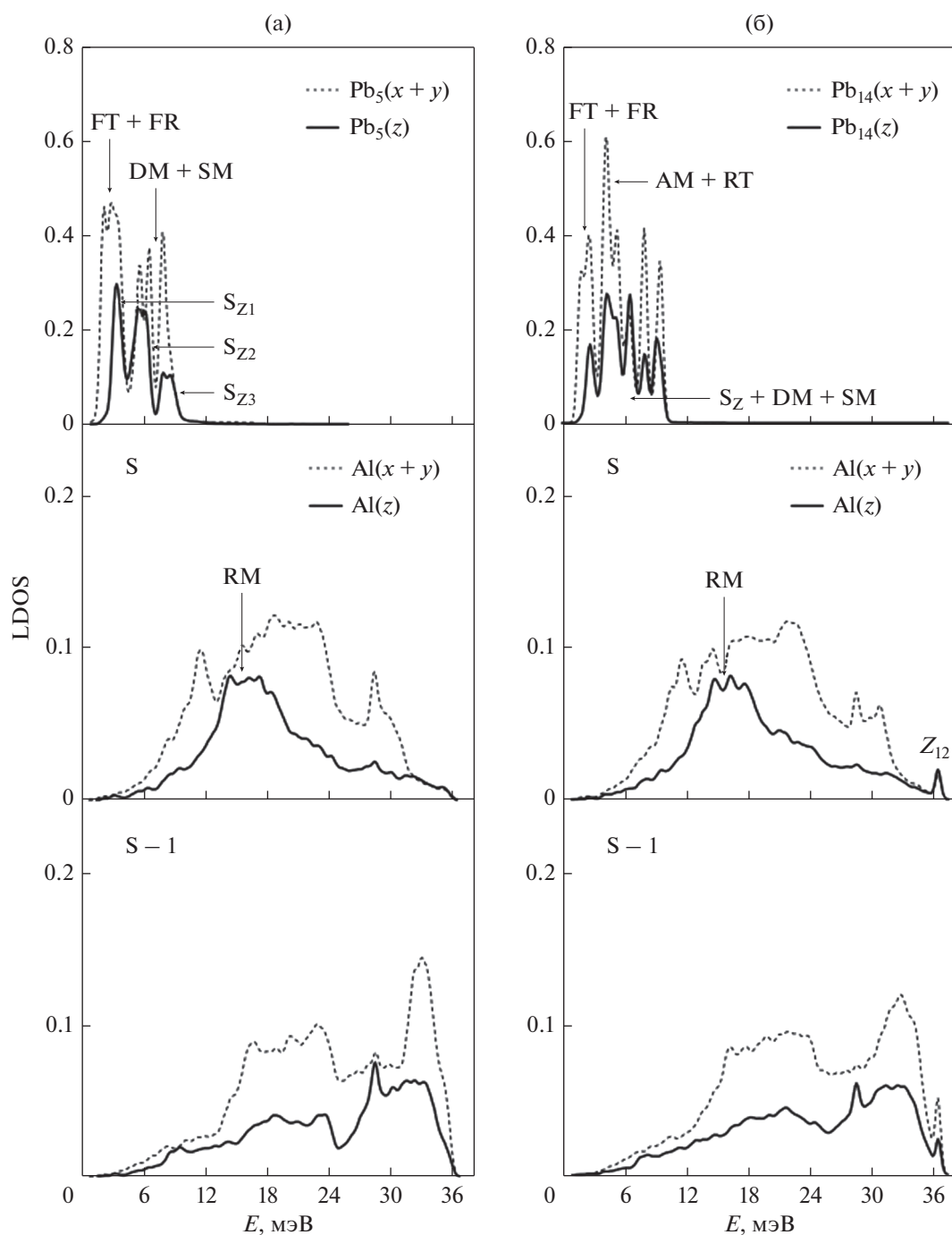


Рис. 4. Распределение локальной плотности состояний (LDOS) в системе Pb_n/Al (001) ($n = 5, 14$). (а) Pb_5/Al (001); (б) Pb_{14}/Al (001). S, S - 1 – поверхностный и подповерхностный слой Al (001).

ветствуют фундаментальным модам взаимодействия “адсорбат – подложка” и обозначены как FT (frustrated translation), FR (frustrated rotation), и S_z (stretch) – моды. Кроме этих мод, также имеются моды собственных колебаний кластера, определяемых деформационными (DM – deformation mode), симметричными (SM – symmetric mode) и антисимметричными (AM – antisymmetric mode) смещениями атомов кластера [1, 10].

Сила взаимодействия и устойчивость кластера на подложке определяются в том числе и степенью гибридизации основных мод кластера с колебательными модами подложки. Как можно видеть из рис. 3а, 3б, для плоских Pb_4 и Pb_9 кластеров степень гибридизации с колебаниями подложки незначительна. Для Pb_4 (рис. 3а) пики, соответствующие FT- и FR-модам, вырождаются, а сами они имеют низкие значения энергии: 2.5 и 2.7 мэВ соответ-

ственно. Помимо пика S_Z -моды с энергией ~ 5 мэВ имеется очень интенсивный пик при 7.1 мэВ, который соответствует собственным деформационным и оптическим колебаниям кластера. При этом колебательные моды подложки и их поляризация сохраняются, уменьшается лишь степень их локализации. Рэлеевская мода поверхности АI (100) смещается в высокочастотную область с незначительным (~ 1.5 мэВ) повышением энергии. Высокая плотность мод в длинноволновой области отражает преимущественное взаимодействие кластера с акустическими фонами подложки. Такое поведение фонной подсистемы в Pb_4/AI (100) свидетельствует о слабой динамической устойчивости кластера к миграции по поверхности подложки и к его десорбции с поверхности. Увеличение размеров кластера до 9 атомов (рис. 3б) хотя и приводит к повышению плотности Z -мод, локализованных на кластере, однако наблюдается их энергетическое размытие. Это обусловлено не усилением гибридизации с Z -колебаниями поверхностных атомов подложки, а увеличением площади контакта. Кроме того, в высокочастотной области появляется локализованный пик собственных антисимметричных колебаний кластера, вырожденных с антифазными ротационными смещениями в плоскости поверхности его угловых и боковых атомов. Энергия этих колебаний максимальна и составляет 9.2 мэВ.

В фонном спектре подложки появляются низкочастотные и высокочастотные Z -колебания, несвойственные для чистой поверхности. При этом гибридизация низкочастотных Z -колебаний атомов подложки с FT- и FR-модами адатомов очень слабая, что лишь незначительно сказывается на их возвратном характере, который препятствует миграции адатомов по плоскости поверхности. Релаксационное усиление взаимодействия атомов поверхностного и подповерхностного слоев приводит к появлению поперечных оптических колебаний подложки. Общая картина динамики плоских кластеров Pb_4 и Pb_9 не имеет заметной размерной зависимости. Очень низкие значения энергий FT-мод и появление ротационных смещений кластера свидетельствуют о его метастабильном состоянии, с низким миграционным барьером.

На рис. 4а, 4б показано распределение плотности колебательных состояний для объемного 5-ти и 14-ти атомного кластера РЬ соответственно. Отличительной особенностью атомных колебаний кластера является равнозначное распределение плотности FT-, FR- и S_Z -мод колебаний. При этом плотность S_Z -мод возрастает за счет локализованных внутри кластерных вертикальных колебаний. Такое соотношение характеризует баланс трансляционных и вертикальных смещений кластера и его конфигурационную устойчивость. Гибридизация с Z -колебаниями поверхностных атомов

подложки повышается незначительно и не вносит заметного вклада в миграционную и десорбционную стабильность кластера. Для 5-ти атомного кластера (рис. 4а) сохраняется вырождение FT- и FR-мод, с незначительным (~ 0.1 мэВ) повышением их энергии. Два следующих пика соответствуют деформационным колебаниям, а также смешанным симметричным и антисимметричным XU -колебаниям атомов, расположенных в основании кластера. Высокочастотные оптические колебания всех атомов кластера соответствуют пику с максимальным значением энергии ~ 8 мэВ. В их LDOS имеются выраженные три пика, определяемых вертикальными смещениями разных групп атомов. Первый пик, в диапазоне энергий от 3.6 до 4.3 мэВ (рис. 4а), определяется симметричными и антисимметричными Z -колебаниями атомов, расположенных в основании кластера. Второй пик соответствует симметричным вертикальным колебаниям всех 5-ти атомов кластера. Форма пика имеет более размытый характер, поскольку в область энергий от 4.5 до 6.4 мэВ также попадают сдвиговые антисимметричные колебания. Собственные, Z -направленные колебания всех атомов кластера, имеют наименьшую локализацию и определяют третий пик в LDOS. Увеличение размера кластера до 14-ти атомов и изменение его конфигурации не приводит к появлению в подложке новых дипольно-поляризованных мод, которые отражали бы усиление межатомных взаимодействий между атомами кластера и подложкой (рис. 4б). Однако конфигурационная устойчивость кластера возрастает, что проявляется в полном вырождении всех типов собственных колебаний кластера. За счет перераспределения колебательных состояний уже по трем атомным слоям, локализация S_Z -мод понижается и пики имеют более размытый характер.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Адсорбция кластера Pb_n приводит к знаменитому характеру релаксации поверхности АI (100), расположенной под кластером. Появляются области растяжения под центром и сжатия под угловыми атомами кластера. При этом сокращение первого межслоевого расстояния максимально под угловыми атомами кластера и составляет более 10%. Это приводит к значительному усилению взаимодействия атомов поверхностного и подповерхностного слоя и к появлению в фонном спектре подложки высокочастотных Z -колебаний, не свойственных чистой поверхности АI (100) и расположенных выше проекции объемных колебаний алюминия. После полной релаксации всей системы Pb_n/AI (001) плоский кластер приобретает куполообразную форму, что свидетельствует о более выгодном формировании кластера по островковому типу.

Анализ атомных колебаний кластеров показывает, что адсорбция плоских кластеров Pb на чистую поверхность Al(100), вне зависимости от размеров, не приводит к формированию динамически устойчивой атомной конфигурации адсорбированного кластера. Слабая степень гибридизации с Z-колебаниями подложки и высокая плотность низкочастотных продольных колебаний кластера указывают на слабую динамическую устойчивость всей системы “плоский кластер Pb_n/Al (100)”. Адсорбированные объемные кластеры демонстрируют значительный рост динамической устойчивости атомной конфигурации самого кластера, однако на усиление динамического взаимодействия с подложкой это не оказывает заметного влияния.

Таким образом, расчет структурных и колебательных характеристик кластеров свинца на чистой поверхности Al (100), имеющих различные размеры и атомную конфигурацию, показал, что возможно формирование лишь динамически метастабильных кластерных образований.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2019-0032.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Metal Clusters at Surfaces: Structure, Quantum Properties*, Physical Chemistry. Ed. By K.-H Meiwes-Broer, Springer. 2000. 310 p.
2. Bogicevic A., Hylgaard P., Wahnström G., Lundqvist B.I. Al Dimer Dynamic on Al (111) // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 172–175.
3. Binary Alloy Phase Diagram // Ed. by T. Massalski, ASM INTERNATIONAL, Materials Park, 1990. 3589 p.
4. Deniozou Th., Ledieu J., Fourné V., Wu D.M., Lograsso T.A., Li H.I., Diehl R.D. Aperiodic and modulated Pb films on fivefold icosahedral Al–Cu–Fe and Al (111): Tailoring the structure of Pb // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 245405–245414.
5. Argile Christine, Rhead Gordon E. Preparation and properties of binary metal monolayers: II. Pb and Sn on Al (100) // Surf. Sci. 1978. V. 78. P. 125–140.
6. Русина Г.Г., Борисова С.Д., Чулков Е.В. Атомная структура и фононы сверхтонкой пленки Pb на поверхности Al (100) // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 261–266.
7. Оура Кендзиро, Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. 2006. М.: Наука, 490 с.
8. Borisova S.D., Ereemeev S.V., Rusina G.G., Stepanyuk V.S., Bruno P., Chulkov E.V. Vibrations of small cobalt clusters on low-index surfaces of copper: Tight-binding simulations // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 075428–075443.
9. Rusina G.G., Borisova S.D., Ereemeev S.V., Sklyadneva I.Yu., Chulkov E.V., Benedek G., Toennies J.P. Surface Dynamics of the Wetting Layers and Ultrathin Films on a Dynamic Substrate: (0.5–4) ML Pb/Cu (111) // J. Phys. Chem. C. 2016. V. 120. P. 22304–22317.
10. Braun J., Ruggerone P., Zhang G., Toennies J.P., Benedek G. Surface phonon dispersion curves of thin Pb films on Cu (111) // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 205423–205436.
11. Shi Z., Lowekamp J., Wynblatt P. A Study of the Pb/Al (100) Interfacial Energy // Metall. Mater. Trans. A. 2002. V. 33A. P. 2569–2572.
12. Landa A., Wynblatt P., Johnson E., Dahmen U. Computer simulation of Pb/Al interfaces // Acta Mater. 2000. V. 48. P. 2557–2563.
13. Plass R., Kellogg G.L. Surface morphology changes during Pb deposition on Cu (100): evidence for surface alloyed Cu (100)-c(2 × 2) Pb nickel // Surf. Sci. 2000. V. 470. P. 106–120.
14. Sklyadneva I.Y., Benedek G., Chulkov E.V., Echenique P.M., Heid R., Bohnen K.-P., Toennies J.P. Mode-Selected Electron-Phonon Coupling in Superconducting Pb Nanofilms Determined from He Atom Scattering // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 095502–095506.
15. Yndurain F., Jigato M.P. First Principles Calculation of Localized Surface Phonons and Electron-Phonon Interaction at Pb (111) Thin Films // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. P. 205501–205505.
16. Борисова С.Д., Русина Г.Г. Атомная структура и колебательные свойства поверхности Cu(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° – Cr // ФММ. 2020. Т. 121. С. 1123–1138.
17. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. EAM: a review of theory and application // Mater. Sci. Rep. 1993. V. 9. P. 251–310.
18. Levesque D., Verlet L. Molecular dynamics and time reversibility // J. Stat. Phys. 1993. V. 72. P. 519–537.
19. Lehman G., Taut M. On the numerical calculation of the density of states and related properties // Phys. Status. Solidi B. 1972. V. 54. P. 469–477.
20. Bohnen K.-P., HO K.-M. First principles calculation of lattice relaxation and surface phonons on Al (100) // Surf. Sci. 1988. V. 207. P. 105–117.
21. Mohamed M.H., Kesmodel L.L. Surface phonon dispersion on Al (100) // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 6519–6520.
22. Sklyadneva I.Yu., Heid R., Bohnen K.-P., Echenique P.M., Chulkov E.V. Surface phonons on Pb (111) // J. Phys.: Condens. Matter. 2012. V. 24. P. 104004–4.