

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТЯЖЕНИЯ МЕДНО-ПЛАТИНОВЫХ НАНОКОНТАКТОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

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

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

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

Поступила в редакцию 4 мая 2020 г.,
после переработки 30 мая 2020 г.
Принята к публикации 1 июня 2020 г.

Методом молекулярной динамики исследовано формирование наноконтактов, состоящих из атомов меди (Cu) и платины (Pt) при различных температурах (0–300 К), относительных концентрациях атомов платины (0–20 %) и направлениях растяжения ([100], [110] и [111]). Область разрыва наноконтакта имеет сложную аморфную структуру, для описания которой предложены три модели. Для определения количественного вклада этих моделей в структуру области разрыва проведен анализ ближнего порядка с помощью функций радиального распределения. Исследована зависимость структуры наноконтакта в области разрыва от температуры.

DOI: 10.31857/S0044451020110103

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время много внимания уделяется исследованию металлических наноконтактов [1–10], которые представляют собой квазиодномерные наноструктуры с необычными электронными и магнитными свойствами [1, 11]. Исследование свойств наноконтактов тесно связано с исследованием процессов, происходящих при их формировании. Существуют три наиболее распространенных подхода к изготовлению наноконтактов: выжигание отверстий в пленке с помощью электронного пучка [12], механически управляемый разрыв тонкого провода [2] и взаимодействие с иглой сканирующего туннельного микроскопа [5].

Формирование медных наноконтактов изучалось во многих работах [3, 13–21]. Так, при исследовании растяжения медных наноконтактов методом молекулярной динамики (МД) было показано, что при температуре 400 К и ориентациях наноконтакта (100), (110) и (111) формируются атомные цепочки [13, 14]. Было установлено, что расстояния между атомами меди в цепочке перед разрывом примерно

на 0.3 \AA больше, чем расстояния в состоянии равновесия, рассчитанные ранее с помощью теории функционала плотности (ТФП) [16]. С помощью МД также были вычислены межатомные расстояния в таких наноконтактах и силы, необходимые для их разрыва [15]. Как показали исследования, при комнатной температуре вероятность формирования атомного контакта наибольшая при растяжении вдоль направлений [111] и [110] [17]. Вероятность формирования атомного контакта может существенно зависеть от направления растяжения. Например, при растяжении палладиевого наноконтакта вдоль направления [110] с вероятностью 30 % формируются атомные контакты, состоящие из двух и более атомов, в то время как при растяжении вдоль направления [111] атомные контакты, состоящие из более чем одного атома, не формируются [22]. Добавление атома водорода или молекулы H_2 увеличивает стабильность медных атомных контактов [3], в то время как добавление атома водорода или молекулы H_2 в платиновый атомный контакт уменьшает его прочность [4]. В экспериментальных исследованиях с помощью просвечивающего электронного микроскопа было обнаружено формирование икосаэдрических структур 1-5-1-5-1 при растяжении наноконтакта вдоль направления [110] при комнатной

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

температуре [18]. Исследования с помощью МД показали, что аналогичные структуры могут быть получены при растяжении медных наноконтактов вдоль направления [100] при температурах от 10 до 600 К [19, 20]. Икосаэдрические структуры могут формироваться также при растяжении медных наноконтактов вдоль направления [111], причем при температуре 200 К вероятность формирования таких структур максимальна [21]. Было установлено формирование подобных структур типа -1-3-1- [23] и 1-4-1-4-1 [6] при моделировании формирования смешанных наноконтактов CoAu с помощью МД.

Формирование платиновых атомных контактов было обнаружено в экспериментальных исследованиях с помощью сканирующего туннельного и просвечивающего электронного микроскопов при комнатной температуре [24, 25]. Исследования с помощью МД показали, что при растяжении вдоль направления [100] при температурах от 50 до 300 К формируются платиновые атомные контакты [8]. При этих температурах происходит смещение атомных плоскостей вдоль плоскости (111). Кроме того, при комнатной температуре формируется нанокontakt со спиральной структурой [26]. При исследовании методом МД было показано, что с вероятностью 34% растяжение платинового наноконтакта вдоль направления [100] при температуре 4.2 К приводит к формированию атомных цепочек длиной от 5 до 11 атомов платины, а иногда могут формироваться и более длинные цепочки [7]. Впоследствии было показано, что при тех же условиях вероятность разрыва наноконтакта, состоящего из одного атома, составляет 4%, а из двух атомов — 60% [10]. В исследовании с помощью ТФП были вычислены такие параметры платиновых наноконтактов, как длины связей в состоянии равновесия, энергии связей, приходящихся на один атом, сила, необходимая для разрыва наноконтакта, и межатомные расстояния в момент разрыва [27].

Несмотря на то что смешанные наноконтакты часто обладают необычными электронными и магнитными свойствами [28–31], до сих пор не были исследованы смешанные медно-платиновые наноконтакты. Данные исследования могут быть интересны в связи с тем, что сплав CuPt обладает рядом интересных свойств. Например, нанопровода CuPt проявляют высокую каталитическую активность [32], а в нанопленках CuPt наблюдается увеличение спинового коэффициента Зеебека [33].

Свойства наноконтакта в первую очередь определяются его структурой. В настоящей работе методом МД исследуются формирование и структура

области разрыва наноконтактов CuPt, полученных с помощью механически управляемого разрыва, при растяжении нанопроводов при различных температурах (0–300 К), относительных концентрациях атомов Pt (0–20%) и направлениях растяжения ([100], [110] и [111]).

2. МЕТОД

Все представленные ниже результаты получены с помощью оригинального программного комплекса, разработанного в нашей научной группе. Программный комплекс позволяет проводить моделирование двухкомпонентных металлических сплавов с помощью классических методов МД, молекулярной статистики и метода Монте-Карло (алгоритм Метрополиса [34]), а также исследовать ближний порядок этих сплавов путем построения функций радиального распределения.

Процесс моделирования состоит из двух этапов: создания начального провода CuPt и растяжения провода до момента разрыва. Для создания провода CuPt был использован следующий алгоритм. Сначала создается трехмерная ячейка со структурой ГЦК-кристалла, заполненная атомами меди. На движение атомов вдоль всех трех направлений накладываются периодические граничные условия. Атомы, попадающие внутрь цилиндра, ось которого расположена вдоль одного из ребер вычислительной ячейки, рассматриваются как атомы, принадлежащие проводу. Диаметр цилиндра около 20 Å. Ось цилиндра совпадает с одним из кристаллографических направлений ГЦК-кристалла: [100], [110] или [111]. Провода, ориентированные вдоль направлений [100], [110] и [111], состояли соответственно из 1110, 1060 и 1194 атомов. Начальная длина проводов, ориентированных вдоль направлений [100], [110] и [111], составляла соответственно 36.15, 25.56 и 37.57 Å. Для моделирования сплава CuPt некоторые атомы меди из цилиндра случайным образом заменяются на атомы платины, причем число заменяемых атомов соответствует относительной концентрации атомов платины в сплаве. После этого атомы меди и платины внутри цилиндра перемешиваются с помощью алгоритма Метрополиса [34] для получения равновесного распределения атомов платины по узлам ячейки. Затем из вычислительной ячейки удаляются атомы, расположенные вне цилиндра, и проводится структурная релаксация атомов внутри цилиндра с помощью метода молекулярной статистики в течение 10^4 шагов. Наконец, про-

вод нагревается до рассматриваемой при моделировании температуры с помощью МД с цепочкой¹⁾ из пяти термостатов Нозе–Гувера [35–37] в течение 10^6 шагов для получения канонического распределения атомов внутри цилиндра. При этом вдоль оси цилиндра использовались периодические граничные условия.

Для моделирования изотермического растяжения наноконтактов применялась классическая МД с цепочкой из пяти термостатов Нозе–Гувера [35–37]. В работе рассматриваются четыре температурных режима: 4.2 К (температура кипения He^4), 77.4 К (температура кипения азота), 200 К и 300 К. Скорость растяжения равна 0.1 м/с. Это значение считается адекватным при моделировании формирования наноконтактов [17, 38, 39]. Среднее время растяжения наноконтакта до разрыва составляло примерно 30 нс ($3 \cdot 10^7$ шагов МД).

Для описания межатомных взаимодействий были использованы потенциалы, полученные в приближении сильной связи [40–42]. Потенциальная энергия взаимодействия атомов равна сумме двух слагаемых: первое соответствует притяжению атомов и содержит многочастичные взаимодействия, а второе представлено в форме Борна–Майера и соответствует отталкиванию атомов:

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

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

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

где r_{ij} — расстояние между атомами с номерами i и j ; α и β — типы атомов; $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$, $r_0^{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}^0$

¹⁾ Использование цепочки термостатов [35] приводит к более быстрому установлению канонического распределения Гиббса в системах, состоящих из атомов с разными массами, по сравнению с оригинальным термостатом Нозе–Гувера [36, 37]. В нашем случае использование цепочки термостатов целесообразно, поскольку атомы Pt более чем в три раза тяжелее атомов Cu.

и $A_{\alpha\beta}^1$ — параметры потенциалов. Функция обрезания $f_c(r_{ij})$ и параметры потенциалов взяты из работы [43]. Межатомные потенциалы (1)–(3) хорошо зарекомендовали себя при моделировании формирования металлических [9, 17, 22, 38, 44] и биметаллических [6, 23] наноконтактов. Отметим, что в настоящее время существует много других феноменологических потенциалов, используемых для моделирования различных металлов и их сплавов. Каждый из них хорош для решения определенного круга задач²⁾. В работе [38] было проведено моделирование растяжения золотых наноконтактов с использованием нескольких часто используемых потенциалов, в частности, потенциала погруженного атома. Было показано, что использование потенциалов, полученных в приближении сильной связи [40, 41], приводит к наиболее адекватным результатам, находящимся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим зависимость удлинения ΔL наноконтакта перед разрывом от температуры T (рис. 1). Для наглядности зависимость аппроксимирована линейной функцией $\Delta L = aT + b$, где $a = 0.0047 \text{ \AA}/\text{K}$ и $b = 31.6687 \text{ \AA}$ в случае растяжения вдоль направления [100], $a = 0.0076 \text{ \AA}/\text{K}$ и $b = 25.2985 \text{ \AA}$ в случае растяжения вдоль направления [110] и $a = 0.03078 \text{ \AA}/\text{K}$ и $b = 35.2939 \text{ \AA}$ в случае растяжения вдоль направления [111]. Независимо от направления растяжения, при росте температуры максимальное удлинение наноконтакта увеличивается. Действительно, рост температуры приводит к увеличению подвижности атомов, а следовательно, и к увеличению эластичности наноконтакта. Независимо от температуры, наибольшее удлинение наблюдается у наноконтактов, растягиваемых в направлении [111], а наименьшее — в направлении [110]. Данная зависимость определяется, в первую очередь, разницей в межплоскостных расстояниях наноконтактов, растягиваемых в различных направлениях. В случае направлений [100], [110] и [111] межплоскостные расстояния равны соответственно 1.8075, 1.2797 и 2.0895 \AA .

Растяжение наноконтакта приводит к уменьшению его диаметра. В результате образуется область разрыва, диаметром около 6 \AA . Дальнейшему уменьшению толщины области разрыва препятству-

²⁾ Очевидно, что универсального эффективного межатомного потенциала, одинаково хорошего для решения любых задач, быть не может.

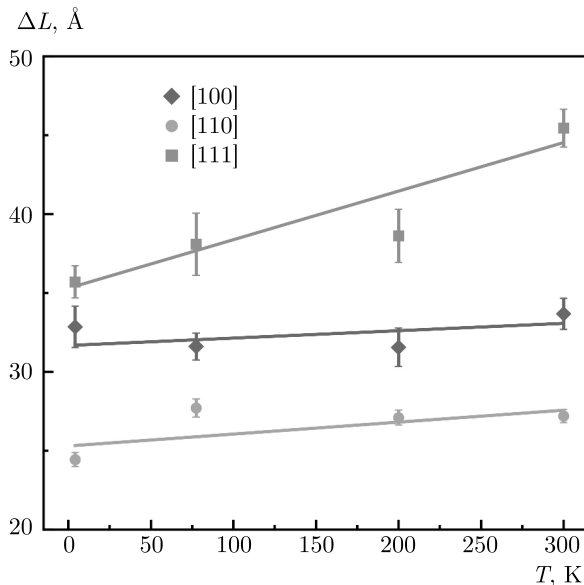


Рис. 1. Зависимости удлинения ΔL наноконтакта перед разрывом от температуры T для направлений растяжения наноконтакта [100], [110] и [111]. Сплошными линиями показана аппроксимация линейными функциями. Относительная концентрация атомов платины 10 %

ет стремление атомов платины оказаться в окружении атомов меди. Это связано с большой величиной энергии связи атомов меди с атомами платины [43, 45]. На рис. 2 представлена полученная зависимость относительной концентрации атомов платины в области разрыва от относительной концентрации атомов платины в проводе. На рисунке показана аппроксимация с помощью линейной функции

$$n_{Pt}^{br} = an_{Pt} + b,$$

где n_{Pt}^{br} — относительная концентрация атомов платины в области разрыва, n_{Pt} — относительная концентрация атомов платины в проводе, $a = 0.9731$ и $b = 0.9646$ %. Окруженные медью атомы платины не могут свободно передвигаться и остаются в области разрыва до момента разрыва наноконтакта. В начальный момент времени атомы платины расположены в наноконтакте согласно каноническому распределению Гиббса, что при малых относительных концентрациях атомов платины соответствует максимальному окружению атомов платины атомами меди. Поэтому при малых концентрациях атомов платины вероятность того, что в процессе растяжения наноконтакта атом меди покинет область разрыва, выше, чем вероятность того, что область разрыва покинет атом платины. Следовательно,

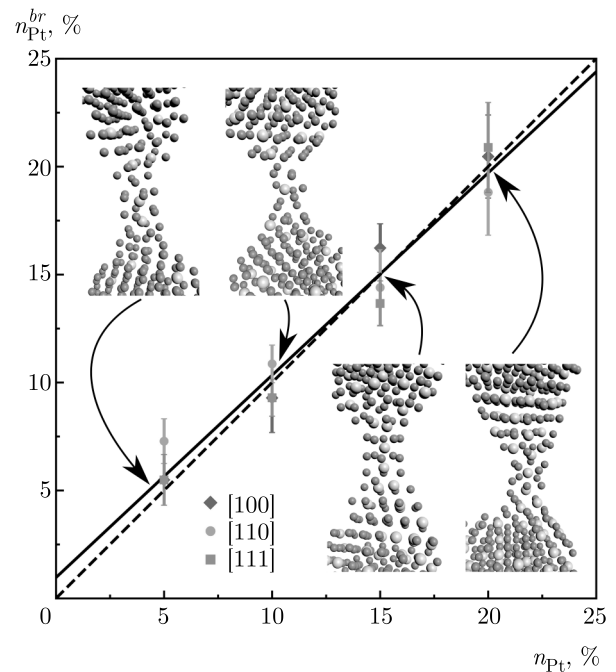


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости относительной концентрации атомов платины, попавших в область разрыва, n_{Pt}^{br} , от относительной концентрации атомов платины в проводе, n_{Pt} , при комнатной температуре для направлений растяжения наноконтакта [100], [110] и [111]. Сплошной линией показана линейная аппроксимация значений, усредненных по направлениям растяжения. Штриховой линией показана зависимость $n_{Pt}^{br} = n_{Pt}$. На вставках изображены характерные области разрыва. Серыми шариками обозначены атомы платины, оранжевыми — атомы меди

но, $n_{Pt}^{br} > n_{Pt}$ при малых значениях n_{Pt} . При больших концентрациях атомов платины ситуация меняется и атомы меди покидают область разрыва реже, чем атомы платины. Следовательно, $n_{Pt}^{br} < n_{Pt}$ при больших значениях n_{Pt} .

На вставках на рис. 2 представлен характерный вид наноконтактов в области разрыва. Видно, что в области разрыва наноконтакт теряет кристаллическую ГЦК-структуру исходного сплава CuPt и приобретает сложную аморфную структуру, которую можно представить в виде совокупности трех моделей³⁾, показанных на рис. 3. Модель 1 представляет собой цилиндр, состоящий из сплава CuPt с ГЦК-решеткой. Относительная концентрация атомов платины соответствует относительной концен-

³⁾ Разнообразие структуры области разрыва контакта, конечно, не исчерпывается полностью приведенными тремя моделями. Однако появление наноконтактов именно с такой структурой наиболее часто наблюдалось при визуальном анализе результатов МД-моделирования.

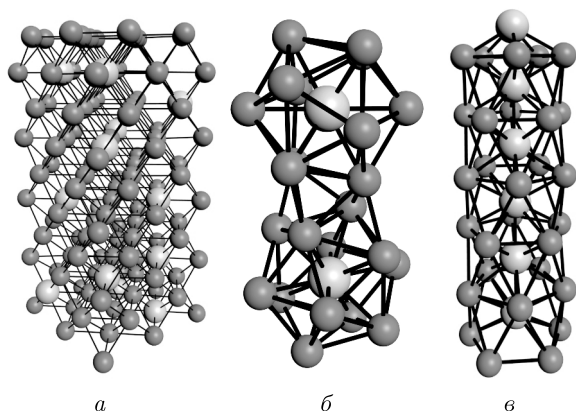


Рис. 3. (В цвете онлайн) Модели области разрыва наноконтакта: а) ГЦК-структура, аналогичная объемному сплаву CuPt (модель 1); б) структура, состоящая из двух центрированных икосаэдров, повернутых друг относительно друга на 90° вокруг оси растяжения (модель 2); в) пентагональная структура [18] (модель 3). Серыми шариками обозначены атомы платины, оранжевыми — атомы меди. Ближайшие соседи соединены сплошными линиями для наглядности

трации атомов платины в растягиваемом проводе. Процедура создания цилиндра аналогична процедуре создания провода, описанной в разд. 2, но его диаметр около 6 \AA . Модель 2 представляет собой два центрированных икосаэдра, повернутых друг относительно друга на 90° вокруг оси растяжения. В узлах икосаэдров находятся атомы меди, а в их центрах — атомы платины. Икосаэдрическая структура характерна для наночастиц размером менее 10 нм, макроскопическая фаза которых имеет ГЦК-решетку [46]. Модель 3 аналогична пентагональной структуре 1-5-1-5-1, представленной в работе [18]. Однако на центральной оси вместо атомов меди находятся атомы платины. Средняя энергия, приходящаяся на один атом в модели 2 (3.182 эВ), меньше, чем в модели 3 (3.477 эВ), потому что в модели 3 число атомов платины, находящихся на расстоянии ближайших соседей с атомами меди, больше, чем в модели 2.

Проведем анализ структуры области разрыва с помощью сравнения значений функций радиального распределения (ФРР) [47, 48] Cu–Cu (C^{CuCu}) и Cu–Pt (C^{CuPt}), вычисленных для моделей 1–3 и для наноконтактов, получаемых при моделировании. Предположим, что ФРР наноконтакта, получаемого при моделировании, является линейной комбинацией ФРР для моделей 1–3, т. е.

$$C_{sim} = \alpha^{M1} C_{M1} + \alpha^{M2} C_{M2} + \alpha^{M3} C_{M3},$$

где коэффициенты α^{M1} , α^{M2} и α^{M3} характеризуют упорядоченность структуры наноконтакта в области разрыва в соответствии с моделями 1–3. Поскольку количество атомов платины в области разрыва на порядок меньше, чем количество атомов меди, при вычислении значений коэффициентов α^{M1} , α^{M2} и α^{M3} учитывались только ФРР Cu–Cu и Cu–Pt. Значения коэффициентов α^{M1} , α^{M2} и α^{M3} вычисляются с помощью минимизации следующей функции:

$$F(\alpha^{M1}, \alpha^{M2}, \alpha^{M3}) = \sum_i \left\{ \left[C_{sim}^{\text{CuCu}}(r_i) - \alpha^{M1} C_{M1}^{\text{CuCu}}(r_i) - \alpha^{M2} C_{M2}^{\text{CuCu}}(r_i) - \alpha^{M3} C_{M3}^{\text{CuCu}}(r_i) \right]^2 + \left[C_{sim}^{\text{CuPt}}(r_i) - \alpha^{M1} C_{M1}^{\text{CuPt}}(r_i) - \alpha^{M2} C_{M2}^{\text{CuPt}}(r_i) - \alpha^{M3} C_{M3}^{\text{CuPt}}(r_i) \right]^2 \right\}. \quad (4)$$

Для вычисления ФРР использовалось следующее выражение [47, 48]:

$$C_{\alpha\beta}(r) = \frac{L^3}{N_\alpha} \left\langle \sum_{j=1}^{N_\alpha} \frac{n_{j\beta}(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right\rangle, \quad (5)$$

где α и β — типы атомов, $n_{j\beta}$ — число атомов типа β , расположенных в сферическом слое толщиной Δr на расстоянии r от атома с номером j , $L = 1 \text{ \AA}$ — нормировочная длина и N_α — число атомов типа α . Угловые скобки обозначают усреднение по всем направлениям радиус-вектора \mathbf{r} и по каноническому ансамблю при рассматриваемой температуре. В случае вычисления ФРР наноконтактов, получаемых при моделировании, также проводилось усреднение по более чем 100 результатам моделирования при каждой температуре. На рис. 4 в качестве примера представлена ФРР Cu–Cu в случае растяжения вдоль направления [100] при относительной концентрации атомов платины 10% и температуре 77.4 К. На рисунке хорошо видны только пики, соответствующие первым, вторым и третьим ближайшим соседям. Поэтому при вычислении коэффициентов α^{M1} , α^{M2} и α^{M3} рассматривались только значения ФРР меньше 4 \AA , т. е. $r_i = i\Delta r \leq r_{max} = 4 \text{ \AA}$ в выражении (4).

Зависимость коэффициентов α^{M1} , α^{M2} и α^{M3} от температуры при относительной концентрации атомов платины 10% представлена на рис. 5. Зависимость $\alpha(T)$ аппроксимировалась с помощью кубического полинома

$$\alpha = aT^3 + bT^2 + cT + d,$$

где значения коэффициентов a, b, c и d равны $-1.152 \cdot 10^{-8} \text{ K}^{-3}$, $8.778 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-2}$, -0.002163 K^{-1}

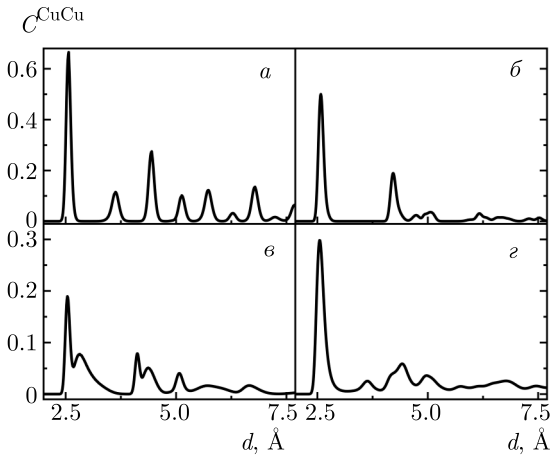


Рис. 4. Функция радиального распределения атомов меди в наноконтакте: а) в модели 1; б) в модели 2; в) в модели 3; г) в наноконтакте, полученном при моделировании. Температура 77.4 К, направление растяжения [100], относительная концентрация атомов платины 10 %

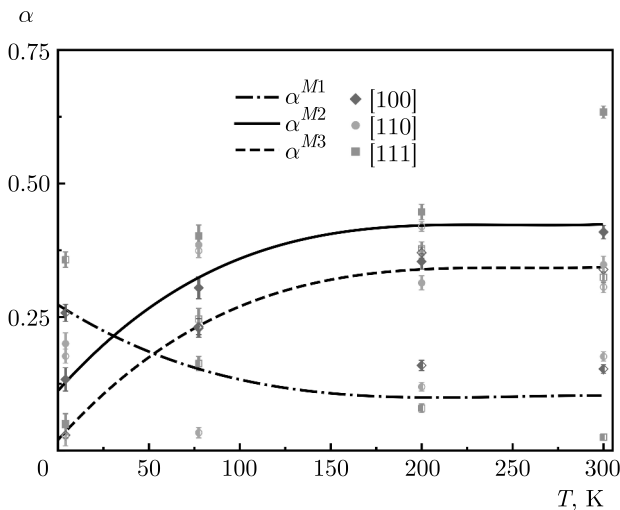


Рис. 5. Зависимости коэффициентов α от температуры для направлений растяжения наноконтакта [100], [110] и [111]. Наполовину заполненные, заполненные и пустые символы соответствуют моделям 1, 2 и 3. Штрихпунктирная, сплошная и штриховая линии соответствуют аппроксимации с помощью кубического полинома зависимостей для моделей 1, 2 и 3. Относительная концентрация атомов платины 10 %

и 0.2729 в случае модели 1, $2.081 \cdot 10^{-8} \text{ K}^{-3}$, $-1.549 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-2}$, 0.003815 K^{-1} и 0.1117 в случае модели 2 и $1.919 \cdot 10^{-8} \text{ K}^{-3}$, $-1.478 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-2}$, 0.003786 K^{-1} и 0.01973 в случае модели 3. На рис. 5 видно, что при низкой температуре область разрыва в основном имеет структуру, аналогичную объемному сплаву (модель 1). С увеличением температуры

вклад модели 1 в структуру области разрыва уменьшается, в то время как вклад моделей 2 и 3 увеличивается. Кроме того, при всех значениях температуры вклад модели 2 оказывается больше, чем вклад модели 3. При температурах выше 200 К значения коэффициентов α почти не меняются.

Данные результаты можно объяснить следующим образом. Перед растяжением провода его структура аналогична модели 1. Структура области разрыва согласно моделям 2 и 3 энергетически более выгодна, чем структура области разрыва согласно модели 1. Но для изменения структуры области разрыва у атомов должна быть возможность перемещаться. Чем выше температура, тем выше подвижность атомов и, следовательно, тем сильнее структура области разрыва становится похожа на структуру моделей 2 и 3. Однако относительная концентрация платины в области разрыва может отличаться от относительной концентрации платины в моделях 2 и 3. Как видно на рис. 2, относительная концентрация атомов платины в области разрыва примерно равна относительной концентрации атомов платины в проводе. В рассматриваемом случае она равна 10%. При этом относительная концентрация атомов платины в модели 2 равна 8.3%, а в модели 3 — 20%. Таким образом, в области разрыва достаточно атомов платины для формирования наноконтакта согласно модели 2, но не хватает атомов платины для формирования наноконтакта согласно модели 3. Поэтому следует ожидать сходства структуры области разрыва со структурой модели 2. Важным фактором является то, что модель 3 энергетически более выгодна, чем модель 2. В связи с этим наблюдается некоторое сходство структуры области разрыва со структурой модели 3 даже при относительных концентрациях атомов платины, меньших 20%.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследованы наноконтакты CuPt методом молекулярной динамики. Установлено, что длина наноконтактов, в которых относительная концентрация атомов платины равна 10%, увеличивается с ростом температуры. Относительная концентрация атомов платины в области разрыва примерно равна относительной концентрации атомов платины в проводе. Однако при небольших относительных концентрациях атомов платины в область разрыва попадает больше атомов платины. Область разрыва наноконтакта имеет сложную аморфную структуру, которая

может быть представлена в виде суперпозиции трех модельных структур: структуры, аналогичной объемному сплаву CuPt; структуры, состоящей из двух центрированных икосаэдров, повернутых друг относительно друга на 90° вокруг оси растяжения, и пентагональной структуры. Для количественного исследования структуры области разрыва вычислены функции радиального распределения Cu–Cu и Cu–Pt. Показано, что при относительной концентрации атомов платины, равной 10%, увеличение температуры приводит к уменьшению вклада первой модели в структуру области разрыва и увеличению вклада второй и третьей моделей, т. е. происходит аморфизация области разрыва.

Благодарности. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М. В. Ломоносова [49, 50].

Финансирование. Данное исследование поддержано Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий, УФН **185**, 1009 (2015).
2. J. M. Krams, J. M. van Ruitenbeek, V. V. Fisun, I. K. Yanson, and L. J. de Jongh, Nature **375**, 767 (1995).
3. Y. N. Duan and J. M. Zhang, Mater. Res. Express **4**, 095010 (2017).
4. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, И. К. Гайнуллин, А. М. Салецкий, Письма в ЖЭТФ **93**, 588 (2011).
5. H. Ohnishi, Y. Kondo, and K. Takayanagi, Nature **395**, 780 (1998).
6. A. L. Klavsyuk, S. V. Kolesnikov, I. K. Gainullin, and A. M. Saletsky, Eur. Phys. J. B **85**, 331 (2012).
7. F. Pauly, M. Dreher, J. K. Viljas, M. Häfner, J. C. Cuevas, and P. Nielaba, Phys. Rev. B **74**, 235106 (2006).
8. S. J. A. Koh, H. P. Lee, C. Lu, and Q. H. Cheng, Phys. Rev. B **72**, 085414 (2005).
9. S. V. Kolesnikov, I. N. Kolesnikova, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, Europhys. Lett. **103**, 48002 (2013).
10. F. Pauly, J. K. Viljas, M. Bürkle, M. Dreher, P. Nielaba, and J. C. Cuevas, Phys. Rev. B **84**, 195420 (2011).
11. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001).
12. V. Rodrigues, T. Fuhrer, and D. Ugarte, Phys. Rev. Lett. **85**, 4124 (2000).
13. E. Amorim, A. Silva, A. Fazzio, and E. da Silva, Nanotechnol. **18**, 145701 (2007).
14. E. Amorim, A. Silva, and E. da Silva, J. Phys. Chem. C **112**, 15241 (2008).
15. E. P. M. Amorim and E. Z. da Silva, Phys. Rev. B **81**, 115463 (2010).
16. S. R. Bahn and K. W. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **87**, 266101 (2002).
17. F. Sato, A. S. Moreira, J. Bettini, P. Z. Coura, S. Dantas, D. Ugarte, and D. Galvao, Phys. Rev. B **74**, 193401 (2006).
18. J. C. González, V. Rodrigues, J. Bettini, L. G. C. Rego, A. R. Rocha, P. Z. Coura, S. O. Dantas, F. Sato, D. S. Galvão, and D. Ugarte, Phys. Rev. Lett. **93**, 126103 (2004).
19. V. K. Sutrakar and D. R. Mahapatra, J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 335206 (2008).
20. V. K. Sutrakar and D. R. Mahapatra, Nanotechnol. **20**, 045701 (2008).
21. P. García-Mochales, S. Peláez, P. A. Serena, C. Guerrero, and R. Paredes, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. **21**, 045002 (2013).
22. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий, Письма в ЖЭТФ **91**, 169 (2010).
23. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий, ФТТ **53**, 2237 (2011).
24. T. Shiota, A. I. Mares, A. M. C. Valkering, T. H. Oosterkamp, and J. M. van Ruitenbeek, Phys. Rev. B **77**, 125411 (2008).
25. T. Kizuka and K. Monna, Phys. Rev. B **80**, 205406 (2009).
26. L. Hui, F. Pederiva, W. Guanghou, and W. Baolin, Chem. Phys. Lett. **381**, 94 (2003).
27. E. Zarechnaya, N. Skorodumova, S. Simak, B. Johansson, and E. Isaev, Comput. Mater. Sci. **43**, 522 (2008).

28. E. M. Smelova, K. M. Tsysar, and A. M. Saletsky, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 8360 (2014).
29. J. Bettini, F. Sato, P. Z. Coura, S. O. Dantas, D. S. Galvão, and D. Ugarte, *Nature Nanotechnol.* **1**, 182 (2006).
30. J. Wang, C. Jo, and R. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 032507 (2008).
31. T. Haug, K. Perzlmaier, and C. H. Back, *Phys. Rev. B* **79**, 024414 (2009).
32. X. Cao, N. Wang, S. Jia, and Y. Shao, *Anal. Chem.* **85**, 5040 (2013).
33. K. Tian and A. Tiwari, *Sci. Rep.* **9**, 3133 (2019).
34. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
35. G. J. Martyna, M. E. Tuckerman, D. J. Tobias, and M. L. Klein, *Mol. Phys.* **87**, 1117 (1996).
36. S. Nosé, *Mol. Phys.* **52**, 255 (1984).
37. W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
38. Q. Pu, Y. Leng, L. Tsetseris, H. S. Park, S. T. Pantelides, and P. T. Cummings, *J. Chem. Phys.* **126**, 144707 (2007).
39. N. Fujita, S. Kurokawa, and A. Sakai, *Phys. Stat. Sol. (b)* **253**, 1149 (2016).
40. V. Rosato, M. Guillope, and B. Legrand, *Phil. Mag. A* **59**, 321 (1989).
41. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
42. N. A. Levanov, V. S. Stepanyuk, W. Hergert, D. I. Bazhanov, P. H. Dederichs, A. Katsnelson, and C. Mas-sobrio, *Phys. Rev. B* **61**, 2230 (2000).
43. S. Dokukin, S. Kolesnikov, A. Saletsky, and A. Klav-syuk, *Surf. Sci.* **692**, 121515 (2020).
44. С. В. Колесников, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий, *ФТТ* **55**, 1834 (2013).
45. S. Dokukin, S. Kolesnikov, A. Saletsky, and A. Klav-syuk, *J. Alloys Compd.* **763**, 719 (2018).
46. В. И. Томилин, Н. П. Томилина, В. А. Бахтина, *Физическое материаловедение*, СФУ, Красноярск (2012).
47. Р. М. Хуснутдинов, А. В. Мокшин, Б. А. Клумов, Р. Е. Рыльцев, Н. М. Щелкачев, *ЖЭТФ* **150**, 306 (2016).
48. J. P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Acad. Press, Burlington (2006).
49. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, “*Lomonosov*”: *Supercomputing at Moscow State University*, Boca Raton, United States (2013).
50. 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).