

# Формирование двухслойных островов Co на поверхности Cu(100)

© С.В. Колесников, А.Л. Клавсюк, А.М. Салецкий

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия

E-mail: kolesnikov\_s\_v@mail.ru

(Поступила в Редакцию 4 июля 2008 г.  
В окончательной редакции 1 ноября 2008 г.)

Формирование и эволюция кластеров Co на поверхности Cu(100) исследованы методом молекулярной динамики и кинетическим методом Монте-Карло. Обнаружено существование двух режимов роста кластеров. Выявлено, что переход от одного режима роста к другому связан с формированием прямоугольных островов Co в первом слое. Исследована зависимость количества атомов Co во втором слое кластера от скорости напыления атомов Co при температурах медной подложки 200 и 300 К.

PACS: 61.46.-w, 68.35.Fx, 68.47.De, 75.47.Np

## 1. Введение

В связи с бурным развитием нанотехнологий особый интерес представляет возможность создания носителей информации наномасштабов. Как было показано в работе [1], атомы кобальта на немагнитной металлической подложке обладают большим магнитным моментом, причем для создания стабильного при температуре 350 К бита достаточно 400 атомов. Плотность размещения информации можно увеличить, используя в качестве носителей многослойные кластеры.

Для создания таких носителей можно использовать различные методы, например метод литографии. Однако более экономичным методом создания наноструктур является самоорганизация при эпитаксиальном росте. Согласно традиционному представлению, рост эпитаксиальных пленок происходит либо послойно (модель Франка–Ван-дер-Мерве), либо путем образования трехмерных островов напыляемого вещества (модель Вольмера–Вебера), либо путем смены первого режима вторым (модель Странского–Крастанова) [2]. Однако в последние годы было обнаружено большое количество эпитаксиальных систем, проявляющих необычные механизмы роста. Ярким примером может служить рост Co на поверхностях Cu(100) и Cu(111). Экспериментально обнаружены такие явления, как покрытие островов Co атомами подложки [3–5] и погружение в подложку наночастиц кобальта размером до 10 nm [6]. Существуют попытки объяснить эти эксперименты различными *ab initio* методами. Например, в работе [7] методом функционала электронной плотности исследованы различные стабильные и метастабильные структуры Co на Cu(100) небольшого размера. Однако с увеличением модельной системы объем вычислений для таких методов резко возрастает. В связи с этим методы *ab initio* в настоящее время неприменимы для исследования больших систем. В данных условиях особый интерес представляют метод молекулярной динамики (МД) [8] и кинетический метод Монте-Карло (КММК) [9]. В работе [10] с помощью КММК была исследована динамика роста

однослойных островов Co на поверхности Cu(100) и объяснено, в частности, такое интересное явление, как *N*-образная зависимость плотности островов от температуры. А в работе [11] методом ускоренной МД была сделана попытка объяснить формирование двухслойных островов Co. Однако методом ускоренной МД при современном уровне развития вычислительной техники невозможно проследить эволюцию системы более чем на десятки миллисекунд. Этого недостатка лишен метод, совмещающий метод МД и КММК, который позволяет изучать эволюцию системы на временных масштабах вплоть до нескольких суток.

В настоящей работе представлены главные механизмы, участвующие в формировании островов Co на поверхности Cu(001), и показана временная эволюция системы.

## 2. Компьютерное моделирование

Описание структурных и динамических свойств атомных систем в общем случае подразумевает решение многочастичной квантово-механической задачи. За исключением простейших случаев, такая задача не имеет аналитического решения, поэтому для нахождения решения обычно пользуются одним из численных методов, который выбирается в зависимости от специфики изучаемой проблемы. В настоящей работе проведено моделирование методом, совмещающим метод МД и КММК. На первом этапе методом МД рассчитываются диффузионные барьеры при температуре  $T = 0$  К для всех возможных событий в нашей модели. На втором этапе с помощью КММК исследуются особенности эволюции системы при различных температурах медной подложки и скорости напыления атомов Co.

При решении задачи нахождения диффузионных барьеров можно считать атомы Cu и Co классическими объектами и свести первоначальную задачу к задаче решения системы уравнений Ньютона, которая легко решается численно методом МД [8]. При этом потенциаль-

ная энергия системы задается следующим образом [12]:

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

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

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

где  $r_{ij}$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  — типы атомов,  $r_0^{\alpha\beta}$ ,  $A_{\alpha\beta}^0$ ,  $A_{\alpha\beta}^1$ ,  $\xi_{\alpha\beta}$ ,  $p_{\alpha\beta}$ ,  $q_{\alpha\beta}$  — параметры межатомного взаимодействия, зависящие от свойств металлов, входящих в систему. Для нахождения этих параметров можно использовать как экспериментальные данные, так и энергетические характеристики гетерогенных наноструктур, полученные *ab initio* методами. Для расчетов мы использовали параметры межатомного взаимодействия, представленные в работе [13].

На втором этапе мы использовали КММК, предложенный в работе [9]. При использовании этого метода мы постулировали следующие утверждения. Во-первых, мы полагаем, что в системе в каждый момент времени может происходить только одно элементарное событие и частоты таких событий равны

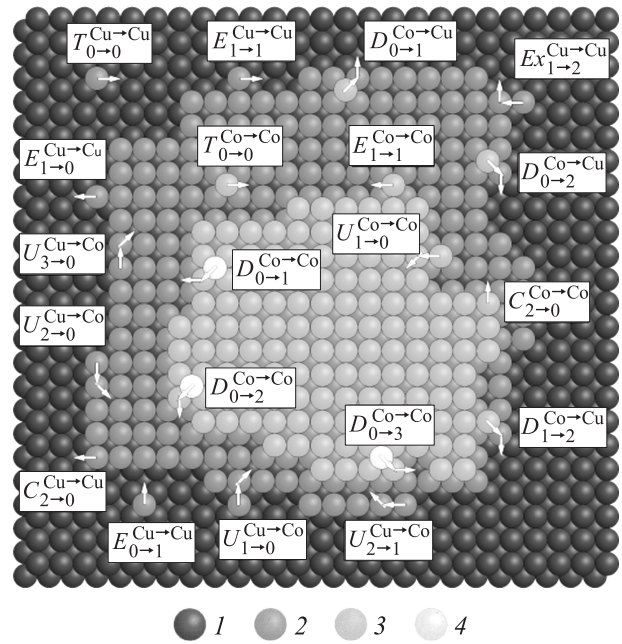
$$\nu_i = \nu_0 \exp \left( -\frac{E_i^D}{kT} \right), \quad (4)$$

где  $E_i^D$  — диффузионные барьеры, найденные методом МД,  $\nu_0 = 10^{12}$  Hz [14–17] — частотный префактор,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура медной подложки. Во-вторых, диффузионные барьеры  $E_i^D$  для  $i$ -го атома определяются только его локальным окружением. В-третьих, события, связанные с образованием вакансий в медной подложке или погружением в нее атомов Со, считаются невозможными. Согласно [10], это предположение оправдано при температуре медной подложки ниже 320 К. Наконец, отметим одну особенность программного алгоритма, реализующего КММК. Чтобы гарантировать, что числа, используемые для выбора событий, являются случайными и равномерно распределенными в интервале (0,1), мы использовали генератор случайных чисел из монографии [18].

### 3. Результаты и обсуждение

В этом разделе мы обсудим основные атомные процессы, относящиеся к формированию двухслойных островов Со на Cu(100), а также с помощью КММК продемонстрируем влияние температуры медной подложки на режим формирования кластеров Со.

Основные атомные процессы, влияющие на рост кластеров Со на поверхности меди, изображены на рис. 1, а диффузионные барьеры для этих процессов, вычисленные методом МД (всего нами было вычислено 90 барьеров), приведены в таблице.



**Рис. 1.** События, определяющие формирование и эволюцию кластера Со на поверхности Cu(100) (более полный список событий приведен в таблице). 1 — атомы Cu, 2 — атомы Со в первом слое, 3 — атомы Со во втором слое, 4 — атомы Со в третьем слое.

Рассмотрим сначала процесс формирования компактных островов Со в первом слое. Напыленные атомы Со случайным образом двигаются по поверхности Cu(100) с барьером  $E(T_{0 \rightarrow 0}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) = 0.524$  eV до тех пор, пока не оказываются вблизи края кластера. После этого атом Со с большой вероятностью присоединится к кластеру (событие  $E_{0 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}$ , рис. 1). Для того чтобы оценить эту вероятность, сравним частоты двух событий  $\nu(E_{0 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) / \nu(T_{0 \rightarrow 0}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) = \exp[(E(T_{0 \rightarrow 0}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) - E(E_{0 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}})) / (kT)]$ , что составляет 15.3 и 6.2 при температуре медной подложки 200 и 300 К соответственно. Таким образом, атом Со присоединится к кластеру с вероятностью  $p(E_{0 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) = 0.84(0.67)$ ; здесь и далее значения указаны для температур 200(300) К. Заметим, что вероятность „отпрыгнуть“ от кластера много меньше, чем вероятность движения вдоль края кластера  $\nu(E_{1 \rightarrow 0}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) / \nu(E_{1 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) = 1.2 \cdot 10^{-17}(5.3 \cdot 10^{-12})$ . Таким образом, атом Со будет двигаться вдоль края кластера до тех пор, пока не достигнет угла кластера, и в случае отсутствия углового атома с высокой вероятностью  $p(E_{1 \rightarrow 2}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) \simeq 1$  вытолкнет ближайший атом в угловое положение ( $\nu(E_{1 \rightarrow 2}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) / \nu(E_{1 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}) = 2.1 \cdot 10^3(1.6 \cdot 10^2)$ ). Поскольку диффузионные барьеры для обратного процесса  $E_{2 \rightarrow 1}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}$  и процесса  $C_{2 \rightarrow 0}^{\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}}$  велики, скачки угловых атомов кластера маловероятны (см. таблицу). Таким образом, в процессе напыления Со форма островов в первом слое будет приближаться к прямоугольной.

Процесс формирования компактных островов во втором слое (и последующих слоях) происходит в общем аналогично, однако существует несколько отличий.<sup>1</sup> Во-первых, диффузионные барьеры для процессов  $T_{0 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$ ,  $E_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$ ,  $E_{1 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$  больше соответствующих барьеров в первом слое (см. таблицу). Во-вторых, вместо события  $Ex_{1 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Co}$  происходят последовательно два события  $E_{3 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$  и  $E_{0 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co}$  (см. таблицу). Поскольку  $\nu(E_{3 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co})/\nu(E_{1 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}) = 1.5 \cdot 10^{-5}(6 \cdot 10^{-4})$  и  $\nu(E_{0 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co})/\nu(E_{1 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co}) = 1.6(1.4)$ , вероятность того, что атом Co, находясь на краю кластера, займет угловое положение, равна  $p(E_{3 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}) \cdot p(E_{0 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co}) \approx 10^{-5}(10^{-4})$ . Таким образом, острова прямоугольной формы во втором слое формируются медленнее, чем в первом.

Сравним теперь скорость формирования кластеров Co при различных температурах. Поскольку диффузионные барьеры для основных атомных процессов лежат в интервале 0.4–1.2 eV (см. таблицу), отношения частот при  $T_1 = 200$  К и  $T_2 = 300$  К равны

$$\frac{\nu_{T_1}}{\nu_{T_2}} = \exp\left(\frac{E^D}{kT} \frac{T_1 - T_2}{T_1 T_2}\right) = 6 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 10^{-10} \quad (5)$$

соответственно. Следовательно, при  $T = 300$  К компактные острова Co на поверхности Cu(100) формируются по крайней мере в  $10^4$  раз быстрее, чем при  $T = 200$  К.

Сценарий роста кластеров значительно усложняется, если рассматривать процессы перехода атомов Co между слоями. Наши вычисления показали, что эти процессы происходят за счет выталкивания граничных атомов кластера вниз или вверх (рис. 1). Рассмотрим сначала переходы атомов Co между первым и вторым слоями кластера в процессе напыления. Эта ситуация характерна тем, что кластеры в первом слое имеют неровные границы, а во втором слое имеются одиночные атомы Co. Как уже обсуждалось выше, атом Co, напыленный на поверхность Cu(100), с высокой вероятностью присоединяется к краю кластера и начинает двигаться вдоль него. Этот атом может вытеснить наверх один из граничных атомов кластера и встать на его место (процесс  $U_{1 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}$ , рис. 1). Поскольку  $\nu(U_{1 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co})/\nu(E_{1 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}) = 0.59(0.71)$ , вероятность  $p(U_{1 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}) = 0.23(0.26)$ . Рассмотрим теперь одиночный атом Co во втором слое. Такой атом, свободно двигаясь по поверхности кластера, может подойти к его границе, вытолкнуть один из граничных атомов кластера вбок и занять освободившееся место в первом слое. Такое событие может произойти как вблизи ровной ( $D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Cu}$ ), так и неровной ( $D_{0 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Cu}$ ) границы (рис. 1). При этом  $\nu(D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Cu})/\nu(T_{0 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}) = 4.2 \cdot 10^{-8}(1.2 \cdot 10^{-5})$ , а  $\nu(D_{0 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Cu})/\nu(T_{0 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}) = 4 \cdot 10^4(1.2 \cdot 10^3)$ ; следовательно,  $p(D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Cu}) \approx 10^{-8}(10^{-5})$  и  $p(D_{0 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Cu}) \approx 1$ . Таким

<sup>1</sup> События, происходящие в первом слое, мы обозначаем верхним индексом Cu  $\rightarrow$  Cu, события, связанные с переходами из первого слоя во второй, — Cu  $\rightarrow$  Co, события, связанные с переходами из второго слоя в первый, — Co  $\rightarrow$  Cu, события, происходящие во втором и последующих слоях, — Co  $\rightarrow$  Co и наконец, события, связанные с переходами между соседними слоями выше первого, мы обозначаем также Co  $\rightarrow$  Co.

События, определяющие формирование и эволюцию кластера Co на поверхности Cu(100)

Процесс	Диффузионный барьер, eV	Процесс	Диффузионный барьер, eV
$T_{0 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Cu}$	0.524	$T_{0 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$	0.680
$E_{0 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}$	0.477	$E_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$	0.639
$E_{1 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Cu}$	1.289	$E_{1 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$	0.987
$E_{1 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}$	0.617	$E_{1 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$	0.688
$E_{0 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}$	0.477	$E_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$	0.639
$E_{1 \rightarrow 3}^{Cu \rightarrow Cu}$	0.06	$E_{1 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co}$	0.267
$C_{2 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Cu}$	1.376	$C_{2 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$	1.018
$Ex_{1 \rightarrow 2}^{Cu \rightarrow Cu}$	0.485	$E_{0 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co}$	0.259
$Ex_{2 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}$	1.151	$E_{3 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$	0.88
$U_{1 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}$	0.626	$U_{1 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$	1.384
$U_{2 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}$	0.899	$U_{2 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$	1.489
$U_{2 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Co}$	0.801	$U_{2 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$	1.305
$U_{3 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}$	1.294	$U_{3 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}$	1.678
$D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Cu}$	0.973	$D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co}$	0.753
$D_{0 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Cu}$	0.497	$D_{0 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Co}$	0.486
$D_{0 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Cu}$	0.397	$D_{0 \rightarrow 3}^{Co \rightarrow Co}$	0.392
$D_{1 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Cu}$	0.767	$D_{1 \rightarrow 2}^{Co \rightarrow Co}$	0.714

Примечание. Верхний индекс показывает, из атомов какого сорта состоит слой, на котором находится рассматриваемый атом, а нижний индекс — количество ближайших соседей в начальном и конечном положении соответственно.

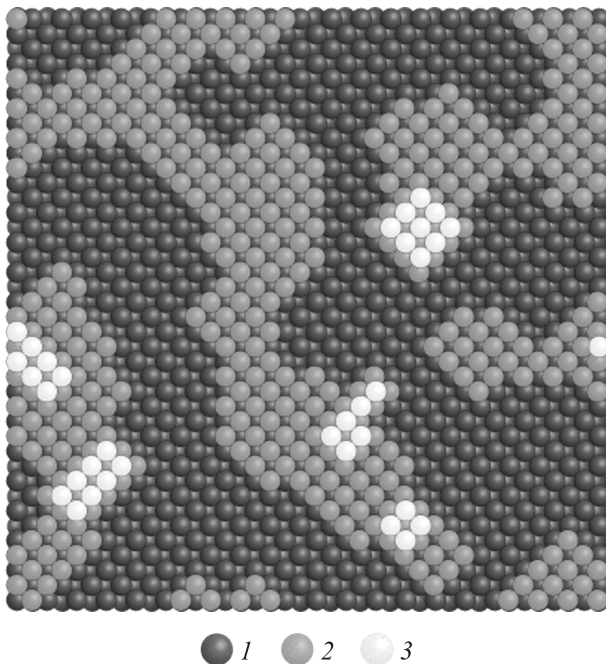
образом, атомы Co, попавшие в процессе напыления во второй слой кластера, будут либо переходить в первый слой, либо образовывать компактные острова во втором слое. Заметим также, что вероятность атома перейти из второго слоя кластера в первый зависит как от неровности границ кластера в первом слое, так и от его размера.

Однако, если после окончания напыления атомов Co в первом слое образуется прямоугольный кластер, а во втором слое нет одиночных атомов Co, то сценарий роста существенно изменяется. Поскольку  $\nu(U_{2 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}) \gg \nu(E_{1 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co}) \gg \nu(Ex_{2 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}) \gg \nu(E_{2 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Cu})$ , процесс  $U_{2 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}$ , заключающийся в том, что один из угловых атомов первого слоя вытесняет одного из своих соседей во второй слой (рис. 1), происходит с большой вероятностью. Вытесненный таким образом атом Co может отойти от края кластера и присоединиться к острову во втором слое. Последующий механизм перехода атомов Co из первого во второй слой таков: сначала с вероятностью  $p(E_{2 \rightarrow 1}^{Cu \rightarrow Cu}) \approx 1$  атом Co отщепляется от угла кластера, движется вдоль границы и с вероятностью  $p(U_{1 \rightarrow 0}^{Cu \rightarrow Co}) = 0.23(0.26)$  вытесняет наверх один из граничных атомов кластера. Так происходит до тех пор, пока кластер в первом слое не оказывается снова прямоугольной формы (но уже

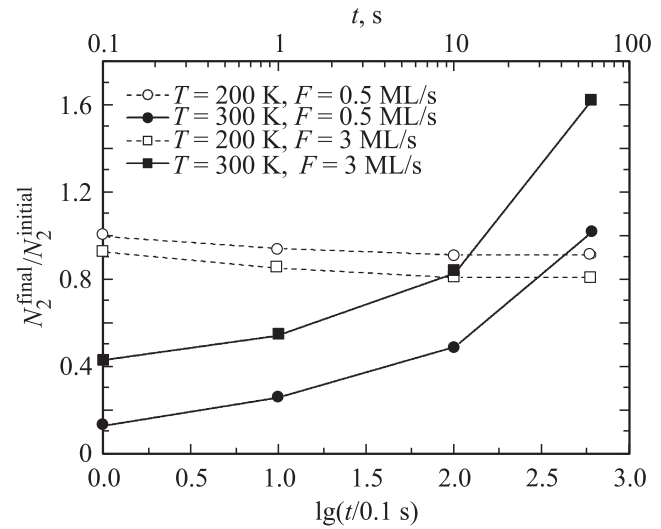
меньших размеров). Таким образом, количество атомов во втором слое кластера Co увеличивается.

Наконец, обсудим вопрос о формировании третьего (и последующих) атомных слоев в кластере Co. Заметим, что частоты переходов атома Co из  $n$ -го в  $(n-1)$ -й слой ( $n > 2$ ) много больше соответствующих частот переходов из второго в первый слой. И наоборот, частоты переходов атома Co из  $(n-1)$ -го в  $n$ -й слой ( $n > 2$ ) много меньше соответствующих частот переходов из первого во второй слой. Например,  $\nu(D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Co})/\nu(D_{0 \rightarrow 1}^{Co \rightarrow Cu}) = 3.5 \cdot 10^5 (5 \cdot 10^3)$ , а  $\nu(U_{1 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Co})/\nu(U_{1 \rightarrow 0}^{Co \rightarrow Cu}) = 8.2 \cdot 10^{-20} (1.9 \cdot 10^{-13})$ . Таким образом, вероятность образования островов Co в третьем слое (и последующих слоях) оказывается малой.

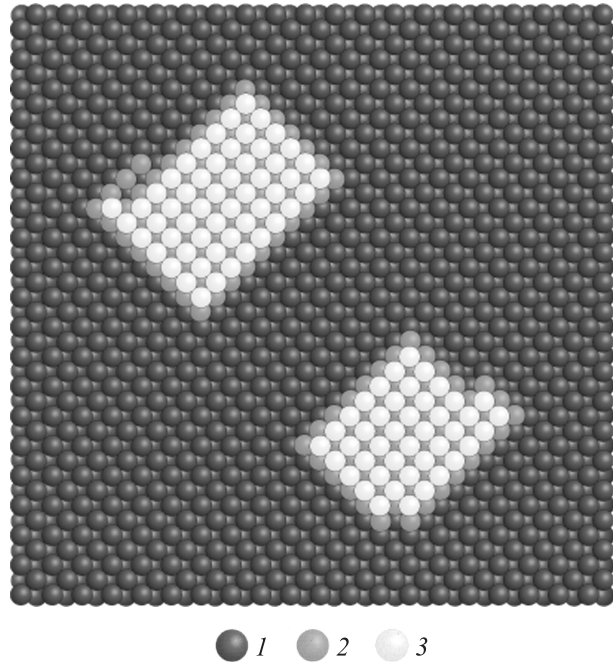
Обсудив основные атомные процессы, вернемся теперь к КММК-моделированию самоорганизации островов Co на поверхности Cu(100) при различных температурах. Как уже упоминалось ранее, сценарий роста двухслойных кластеров Co зависит от того, насколько быстро в первом слое образуются компактные острова. Рассмотрим сначала эпитаксиальный рост кластеров при температуре 200 К. Как видно из рис. 2, компактные острова Co в первом слое не формируются даже спустя час после начала напыления (мы моделируем напыление половины монослоя  $D = 0.5$  ML, которое заканчивается приблизительно через  $\tau = 0.17-5$  с для скорости напыления  $F = 3-0.5$  ML/s соответственно). Таким образом, в процессе напыления и после его окончания число



**Рис. 2.** Конфигурация кластера Co на поверхности Cu(100) при температуре медной подложки  $T = 200$  К, скорости напыления  $F = 3$  ML/s и количестве напыленных атомов Co  $D = 0.5$  ML через час после начала напыления. Размер ячейки моделирования  $7.23 \times 7.23$  nm. 1 — атомы Cu, 2 — атомы Co в первом слое, 3 — атомы Co во втором слое.



**Рис. 3.** Зависимость отношения числа атомов Co во втором слое  $N_2^{\text{final}}$  к числу атомов Co, попавших во второй слой при напылении,  $N_2^{\text{initial}}$  от времени при  $T = 200$  К (штриховые линии) и 300 К (сплошные линии).



**Рис. 4.** Конфигурация кластера Co на поверхности Cu(100) при температуре медной подложки  $T = 300$  К, скорости напыления  $F = 3$  ML/s и количестве напыленных атомов Co  $D = 0.5$  ML через час после начала напыления. Размер ячейки моделирования  $7.23 \times 7.23$  nm. 1 — атомы Cu, 2 — атомы Co в первом слое, 3 — атомы Co во втором слое.

атомов во втором слое уменьшается до тех пор, пока во втором слое не образуются компактные острова (рис. 3). Поскольку при увеличении скорости напыления острова Co в первом слое оказываются менее компактными, число атомов во втором слое убывает.

При температуре медной подложки 300 К компактные острова Co в первом слое формируются достаточно быстро, следовательно, реализуется сценарий роста кластера, приводящий к увеличению числа атомов Co во втором слое (рис. 3). Такой процесс будет продолжаться до тех пор, пока второй слой кластера не покроет первый (рис. 4). Так как при увеличении скорости напыления возрастает число компактных островов Co во втором слое, формирующихся в процессе напыления, число атомов во втором слое возрастает при увеличении скорости напыления. С другой стороны, при увеличении скорости напыления возрастает число кластеров в первом слое, следовательно, уменьшается их площадь, что приводит к уменьшению скорости роста второго слоя. Таким образом, зависимость числа атомов во втором слое от скорости напыления ( $F = 0.1-3$  ML/s) является монотонно возрастающей и имеет отрицательную вторую производную.

#### 4. Заключение

В результате моделирования эпитаксиального роста кластеров Co на поверхности Cu(100) мы получили следующие результаты.

Во-первых, острова Co (как в первом, так и во втором слое) эволюционируют так, чтобы принять наиболее компактную форму. Однако, если при комнатной температуре ( $T \approx 300$  К) острова прямоугольной формы формируются достаточно быстро (в течение 10 s после окончания напыления), то при  $T = 200$  К формирования прямоугольных островов не происходит.

Во-вторых, можно выделить две стадии роста кластера Co на поверхности Cu(100): на первой стадии число атомов Co во втором слое уменьшается со временем, а на второй увеличивается до тех пор, пока второй слой полностью не покроет первый. При этом переход от первой стадии роста ко второй происходит вследствие формирования прямоугольных островов в первом слое кластера.

#### Список литературы

- [1] P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S.S. Dhesi, C. Grazioli, A. Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P.H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone, H. Brune. *Science* **16**, 1130 (2003).
- [2] H. Brune. *Surf. Sci. Rep.* **31**, 121 (1998).
- [3] H. Li, B.P. Tonner. *Surf. Sci.* **237**, 141 (1990).
- [4] J. de la Figuera, J.E. Prieto, C. Ocal, R. Miranda. *Phys. Rev. B* **47**, 13 043 (1993).
- [5] M.O. Pedersen, I.A. Bönicke, E. Lægsgaard, I. Stensgaard, A. Ruban, J.K. Nørskov, F. Besenbacher. *Surf. Sci.* **387**, 86 (1997).
- [6] C.G. Zimmermann, M. Yeadon, K. Nordlund, J.M. Gibson, R.S. Averback, U. Herr, K. Samwer. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1163 (1999).
- [7] R. Pentcheva, M. Scheffler. *Phys. Rev. B* **61**, 2211 (2000).
- [8] D.W. Heerman. *Computer simulation methods in theoretical physics*. Springer (1990).
- [9] K.A. Fichthorn, W.H. Weinberg. *J. Chem. Phys.* **95**, 1090 (1991).
- [10] R. Pentcheva, K.A. Fichthorn, M. Scheffler, T. Bernhard, R. Pfandzelter, H. Winter. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 076 101 (2003).
- [11] R.A. Miron, K.A. Fichthorn. *Phys. Rev. B* **72**, 035 415 (2005).
- [12] F. Cleri, V. Rosato. *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
- [13] V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, L. Niebergall, A.M. Saletsky, W. Hergert, P. Bruno. *Phase Trans.* **78**, 61 (2005).
- [14] A. Bogicevic, J. Strömquist, B.I. Lundqvist. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 637 (1998).
- [15] S. Ovesson, A. Bogicevic, B.I. Lundqvist. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2608 (1999).
- [16] K.A. Fichthorn, M. Scheffler. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5371 (2000).
- [17] M. Muller, K. Albe, C. Busse, A. Thoma, T. Michely. *Phys. Rev. B* **71**, 075 407 (2005).
- [18] Numerical recipes in Fortran90. [www.library.cornell.edu/nr/cbookf90pdf.html](http://www.library.cornell.edu/nr/cbookf90pdf.html).