

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.2:539.216.2

СУБМОНОСЛОЙНАЯ СТРУКТУРА Ni(111) – $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ –Pb: АТОМНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

© 2023 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.ru

Поступила в редакцию 21.02.2023 г.

После доработки 09.03.2023 г.

Принята к публикации 14.03.2023 г.

Обсуждаются результаты теоретического исследования структурных и динамических параметров поверхностных фаз (адсорбционной и фазы поверхностного сплава), формирующихся при адсорбции 0.33 монослоя Pb на Ni(111). Расчеты выполнялись с использованием межатомных потенциалов, получаемых в рамках метода внедренного атома. Анализ стабильности поверхностных фаз проводился на основе данных о равновесной атомной конфигурации, фононных спектрах, локальной плотности фононных состояний и поляризации локализованных колебательных мод. Показано, что из двух возможных поверхностных фаз, поверхностный сплав Pb–Ni обладает наибольшей динамической стабильностью.

Ключевые слова: двумерные поверхностные структуры, релаксация, динамика поверхности

DOI: 10.31857/S0015323023600284, **EDN:** OLAGDQ

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию начальной стадии роста и морфологии субмонослойных пленок тяжелых элементов IV группы на подложках из благородных и переходных металлов уделяется большое внимание как экспериментаторов [1–3], так и теоретиков [4–9]. Это позволяет проводить управляемый рост пленок и направленно модифицировать их свойства путем создания уникальных, невозможных в объемном состоянии, поверхностных биметаллических соединений. Именно от первых этапов роста зависят ориентация по отношению к подложке и кристаллическая структура пленки, что во многом определяет ее физико-химические свойства. Несмотря на отсутствие объемного аналога, такие бинарные металлические соединения атомарной толщины открывают новые возможности для получения, в том числе, сверхпроводящих свойств в низкоразмерных системах [9–11]. Не менее важным прикладным значением обладают биметаллические поверхностные соединения для каталитических реакций. Зачастую эти соединения имеют свойства, резко отличающиеся от свойств исходных металлов, что дает возможность создания новых катализаторов с повышенной избирательностью, активностью и стабильностью [5, 12]. К настоящему времени различными структурными методами установлено, что при субмонослойной адсорбции тяжелых элементов на металлическую поверхность (111)

формируются двумерные поверхностные фазы [1–4]. Это может быть либо адсорбированный слой (адслой), состоящий только из адатомов, либо поверхностный сплав. На стабильность таких поверхностных фаз большое влияние оказывают как структурные параметры поверхности, так и материал подложки. Например, в работе [2] было показано, что при адсорбции 0.33 монослоя (МС) Sn и Pb на плотноупакованную поверхность (111) Ag и Cu наиболее стабильной поверхностной фазой является поверхностный сплав со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$. В обоих случаях адатомы занимали такие положения адсорбции, которые инициировали появление дефекта упаковки ABCBCA на интерфейсе. В то же время экспериментальные исследования показали, что при адсорбции 0.33 МС Pb на поверхность Ni(111), поверхностный сплав Pb–Ni со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ формируется только после высокотемпературного отжига (600–850 К). Однако в общем виде субмонослойная адсорбция Pb на поверхность Ni(111) приводит к появлению упорядоченных адсорбционных сверхструктур [1–4]. При этом дефект упаковки ABCBCA на интерфейсе отсутствует. Поэтому для описания условий стабильности поверхностной фазы помимо структурных факторов немалое значение имеет динамическое поведение всей системы. Определение формы фононных спектров и их анализ позволяют выявить наличие в законе дисперсии низкочастотной дисперсионной вет-

ви. Как правило, наличие низкочастотных продольных колебаний, определяемых трансляционными смещениями адатомов, оказывает значительное влияние на поверхностные процессы, зачастую являясь их прекурсорами.

Выбор материалов исследования обусловлен тем, что на сегодняшний момент низкоразмерная бинарная система Pb/Ni является одним из перспективных и технологически востребованных соединений, несмотря на отсутствие взаимной растворимости в объемном состоянии. В частности, у данной системы была обнаружена анизотропная сверхпроводимость, которая была инициирована эффектом близости при создании однослойного бинарного сплава Ni–Pb [10]. В сверхтонких пленках свинца на поверхностях ряда благородных и переходных металлов проявляются квантовые эффекты, которые имеют значение для квантовой электроники и спинтроники [7, 13].

Цель настоящей работы – описание структурных и динамических особенностей поверхностных фаз со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, проявляющихся в форме адслоя Pb на поверхности Ni(111) и поверхностного сплава Pb–Ni. В работе обсуждаются релаксация поверхности подложки, дисперсионные кривые, плотность распределения и поляризация локализованных колебательных состояний на адатомах и в слоях подложки.

МЕТОД РАСЧЕТА

Расчет равновесной атомной структуры и фоновых спектров поверхностных фаз Ni(111)– $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ –Pb проводили с использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в EAM (embedded atom method) [14], который успешно используется для исследования структурных и колебательных свойств поверхностей с адатомами и адкластерами [15, 16]. Многочастичные взаимодействия в данном методе учитываются через функцию погружения F_i , заданную в точке r_i , которая определяется суперпозицией электронных плотностей всех остальных атомов, расположенных в узлах r_j .

Плотности $\rho_j^a(r_{ij})$ получаются из решения задачи для свободного атома в приближении функционала локальной плотности. Парные взаимодействия описываются потенциалом $\phi(r_{ij})$, который имеет вид экранированного кулоновского потенциала и для описания взаимодействия атомов разных элементов используется в форме, предложенной в работе [16].

Равновесную геометрию поверхностных структур определяли стандартным методом молекулярной динамики при температуре $T = 0$ К по миниму-

му полной энергии всей системы, точность расчета которой составляла 10^{-4} эВ. Расчетная ячейка содержала 1920 атомов (30 атомных слоев, содержащих по 64 атома в слое). При этом 10 нижних слоев являлись статическими. На систему накладывались периодические граничные условия в плоскости поверхности. Для демпфирования скоростей использовалась схема Верлета [17], с временным шагом $h = 1 \times 10^{-12}$ с. Вертикальная релаксация Δ_j соответствует изменению межплоскостных расстояний относительно их объемных значений. Знаки “–” и “+” означают сокращение и расширение соответствующих расстояний. Поверхность моделировалась тонкой пленкой (31 атомный слой (111) никеля), на противоположные стороны которой наносились адатомы Pb в сверхструктуре $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, соответствующей адсорбции в 0.33 МС. Собственные значения частот колебаний и векторов поляризации колебательных мод рассчитывали методом динамической матрицы. Локальные плотности колебательных состояний определяли проекцией этих собственных значений на атомы свинца или никеля в направлениях X , Y или Z .

В работе были исследованы две поверхностные фазы. В первом случае после релаксации адатомы Pb занимали 3-х центровые ГЦК-положения адсорбции и формировали слой из адатомов Pb. Во втором случае адатомы занимали 6-ти центровые положения, замещая каждый третий поверхностный атом подложки и формируя поверхностный сплав Pb–Ni. Для сверхструктуры $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ характерно 3-х кратное уменьшение двумерной зоны Бриллюэна (ЗБ) (1×1) и отражения симметричных точек в новые положения $\bar{M}' \leftarrow \bar{M}$, $1/2\bar{\Gamma}\bar{K}$; $\bar{K}' \leftarrow 2/3\bar{\Gamma}\bar{M}$; $\bar{\Gamma}' \leftarrow \bar{K}, \bar{\Gamma}$. Атомные смещения вдоль направлений $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$, $[111]$ соответствуют X -, Y - и Z -поляризации.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА. ОБСУЖДЕНИЕ

На первом этапе была определена равновесная геометрия поверхности пленки Ni(111) в отсутствии адатомов Pb. Отсчет атомных слоев ведется от поверхности вглубь пленки: первый слой – поверхностный Ni₁, второй слой – подповерхностный Ni₂ и т.д. Релаксация поверхности Ni(111) составила $\Delta_{12} = -0.6\%$, $\Delta_{23} = -0.3\%$, что находится в согласии с данными DFT (density functional theory) расчета $\Delta_{12} = -0.9\%$ и $\Delta_{23} = -0.01\%$ [18] и LEED (low electron energy diffraction) эксперимента $\Delta_{12} = -1.2\%$ [19].

На рис. 1а–1г приведены геометрические модели возможных адсорбционных поверхностных

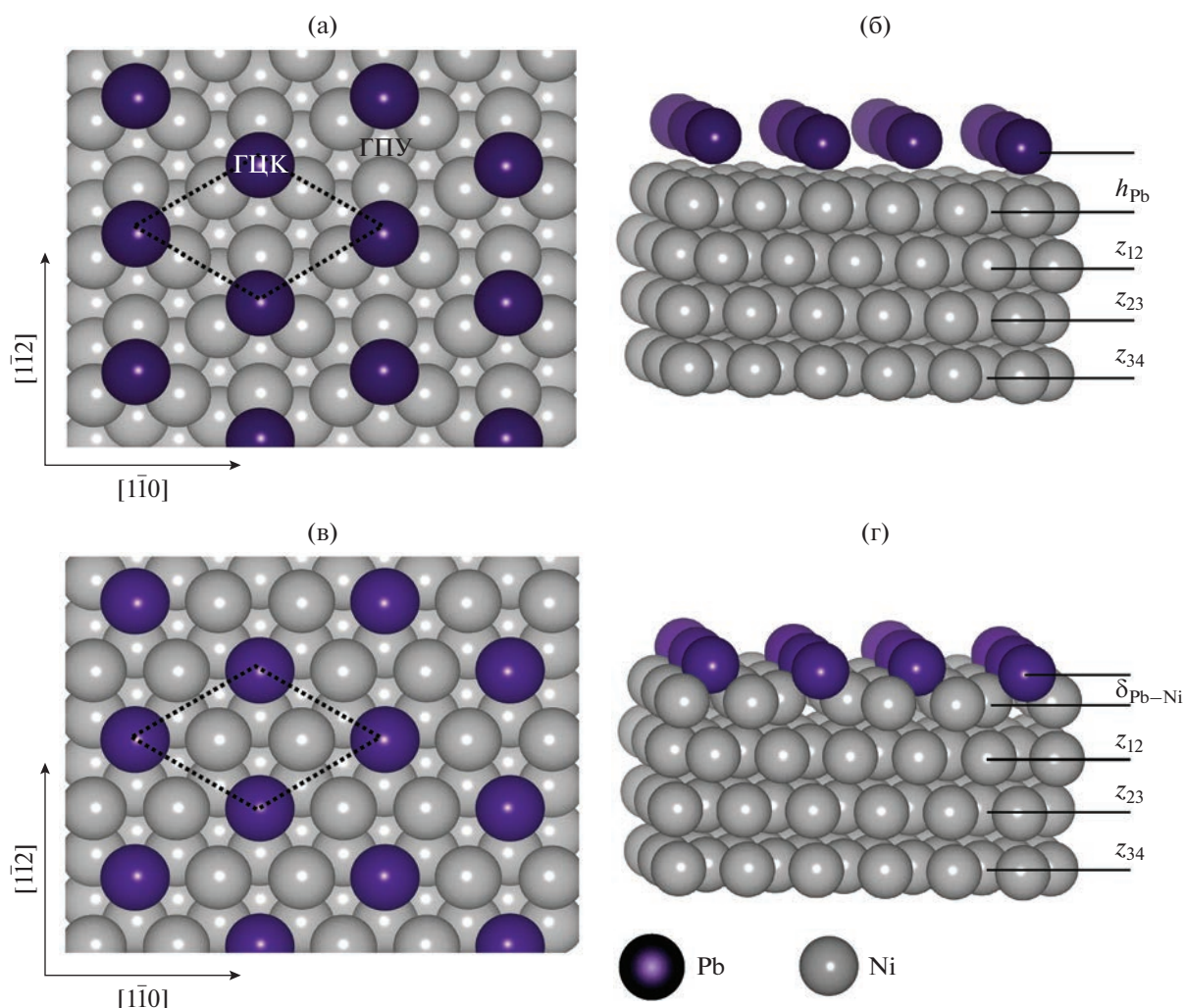


Рис. 1. Геометрические модели структуры Ni(111)– $3 \times \sqrt{3}$ – $R30^\circ$ –Pb (а) и (б) вид сверху и сбоку на адслой Pb (адатомы в ГЦК-положениях), (в) и (г) вид сверху и сбоку на поверхностный сплав Pb–Ni (адатомы в положениях замещения). h_{Pb} (Å) – расстояние от атома Pb до поверхности подложки; $\delta_{\text{Pb–Ni}}$ (Å) – величина коробления в плоскости поверхностного сплава Pb–Ni; z_{12} , z_{23} , z_{34} – межслоевые расстояния в пленке Ni(111).

фаз Ni(111)– $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ –Pb: 1) адатомы Pb находятся в 3-центровых ГЦК-положениях и формируют адслой Pb с ближайшим межатомным расстоянием Pb–Ni 2.77 Å; 2) адатомы Pb замещают каждый третий атом Ni в поверхностном слое подложки и формируют поверхностный сплав с межатомным расстоянием Pb–Ni 2.75 Å, что согласуется с экспериментальным значением 2.64 ± 0.16 Å [2].

В случае поверхностного сплава наибольшее коробление характерно для Pb–Ni₁-слоя. Это обусловлено положением адатомов Pb в поверхностном слое выше атомов Ni₁ из-за разницы атомных радиусов. Полученная величина коробления соответствует данным эксперимента и DFT расчета, что указывает на адекватное описание EAM потенциалами равновесной структуры

рассматриваемых поверхностных фаз. Также незначительное коробление ~ 0.002 Å обнаруживается в Ni₄-слое подложки вследствие 3%-ного сокращения первого межслоевого расстояния и разнонаправленного смещения атомов подложки, расположенных непосредственно под атомами Pb, и всех остальных атомов Ni. Также хорошее согласие с экспериментом наблюдается для межатомного расстояния Pb–Pb, которое составило 4.316 Å (эксперимент 4.32 Å) [1]. Для обеих поверхностных фаз оптимизация структуры проводилась одновременно для всей системы адатом–подложка. В табл. 1 приведены рассчитанные равновесные структурные параметры совместно с экспериментальными данными, полученными с использованием LEED и MEIS (medium–energy ion scattering) и DFT расчета из первых принципов.

Таблица 1. Структурные параметры: $Z_{ij}(\text{\AA})$ – межслоевые расстояния в пленке Ni(111); $\Delta_{ij}(\%)$ – вертикальная релаксация; $h_{\text{Pb}}(\text{\AA})$ – расстояние от адатома до поверхности подложки; $\delta_{\text{Pb-Ni}}(\text{\AA})$ – коробление в плоскости сплава Pb–Ni. Эксперимент – [1, 2]; DFT расчет – [4]

Адсорбционная пленка Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb				
Метод	$Z_{12}; \Delta_{12}$	$Z_{23}; \Delta_{23}$	Z_{34}	h_{Pb}
EAM	2.02; –0.5	2.03; –0.2	2.03	2.36
MEIS [1]	1.97	–	–	2.55
DFT [4]	2.02	2.05	2.02	2.21
Поверхностный сплав Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb				
Метод	$Z_{12}; \Delta_{12}$	$Z_{23}; \Delta_{23}$	Z_{34}	$\delta_{\text{Pb-Ni}}$
EAM	1.97; –3.0	2.03; –0.3	2.03	1.10
LEED [2]	2.00	2.04	2.00	0.73
DFT [4]	1.90	2.03	2.03	0.99

Как видно из табл. 1, адслой Pb не приводит к заметным структурным изменениям в поверхностных слоях подложки. Релаксационные сокращения первых двух межслоевых расстояний соответствуют значениям чистой поверхности Ni(111). Присутствие Pb проявляется лишь в незначительном $\sim 0.001 \text{ \AA}$ короблении Ni_3 слоя подложки и появлении в Ni_2 слое латеральных смещений атомов Ni на $\sim 0.01 \text{ \AA}$.

На рис. 2а, 2б приведены фоновые спектры и локальная плотность колебательных состояний (LDOS) для адслоя Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb. Как можно видеть из рис. 2а в фоновом спектре все локализованные на адатомах Pb состояния расположены ниже дна проекции объемных колебаний никелевой подложки. Дипольно-активная мода совместных Z-поляризованных колебаний Pb и атомов с Ni_1 слоя имеет энергию $\sim 9.2 \text{ мэВ}$. Моды продольных колебаний адатомов, отражающие латеральное взаимодействие адатомов в плоскости адслоя, распространяются в области низких частот. Особенностью этих мод являются независимые и взаимно перпендикулярные X- и Y-смещения атомов Pb вдоль симметричных направлений $\bar{\Gamma}\bar{K}'$ и $\bar{\Gamma}\bar{M}'$ двумерной ЗБ, вызванные переходом энергии растягивающей Z-моды подложки в трансляционную моду адсорбата посредством их гибридизации. Такие низкочастотные Z-колебания поверхностных атомов подложки отсутствуют в фоновом спектре чистой поверхности Ni(111) и инициированы адатомами Pb. В точке $\bar{K}'$

эти моды вырождены и имеют энергию 1.4 мэВ . Далее в направлениях $\bar{K}'\bar{M}'$ и $\bar{\Gamma}\bar{M}'$, они расщеплены на две X,Y-поляризованных моды и в точке $\bar{M}'$ между состояниями имеется выраженная энергетическая щель в 1.97 мэВ .

Однако энергия моды с $X > Y$ -поляризацией снижается до очень низкого значения в 0.23 мэВ . Анализ рассчитанных векторов поляризации показал, что в симметричной точке $\bar{M}'$, расположенной на границе двумерной ЗБ, для $Y > X$ -моды, с энергией 2.2 мэВ , в направлениях $\{112\}$ характерно связанное и упорядоченное смещение атомов Pb, объединенных в тройки. Самая низкочастотная $X > Y$ -мода определяется неупорядоченными индивидуальными смещениями атомов Pb, в которых наименьшую энергию имеет компонента смещений вдоль направления $[110]$. Наиболее наглядно локализация и поляризация колебаний адатомов Pb представляются локальной плотностью колебательных состояний (LDOS), приведенной на рис. 2б. Как видно в LDOS, локализованным на адатомах состояниям соответствуют три сильно выраженных пика. Два нижних соответствуют продольным колебаниям атомов Pb, на которые приходится $\sim 96\%$ локализации, и лишь 4% приходится на инициированные адсорбцией Z-колебания атомов подложки с Ni_1 -слоя. Для адслоя Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb характерен низкочастотный сдвиг локализованных на адатомах продольных колебаний почти до нулевых значений. Для устойчивости адсорбционной структуры такой сдвиг продольных колебаний представляется критическим. При этом для данной структуры характерно достаточно высокое значение энергии вибрационных колебаний атомов Pb, направленных перпендикулярно поверхности Ni(111).

Что касается колебательных состояний подложки, то, как можно видеть на рис. 2а, 2б и в табл. 2, общая картина распределения колебательных состояний поверхности Ni(111) характеризуется энергетическим размытием рэлееской моды (PM) и ее высокочастотным сдвигом в точках $\bar{M}'$ и $\bar{\Gamma}'$ новой ЗБ на ~ 3.6 и $\sim 0.5 \text{ мэВ}$ соответственно. В тоже время увеличение энергетической области появления продольных колебательных состояний в фоновом спектре приводит к его расширению на $\sim 2.0 \text{ мэВ}$. В низкочастотной области при 1.4 и 9.2 мэВ появляются новые Z-поляризованные колебательные состояния, обусловленные взаимодействием с адатомами Pb и отсутствующие в фоновом спектре чистой поверхности Ni(111) [19].

Рассчитанный фоновый спектр и LDOS поверхностного сплава Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb приведен на рис. 2в, 2г. Как и в предыдущем случае, колебательные состояния адатомов распро-

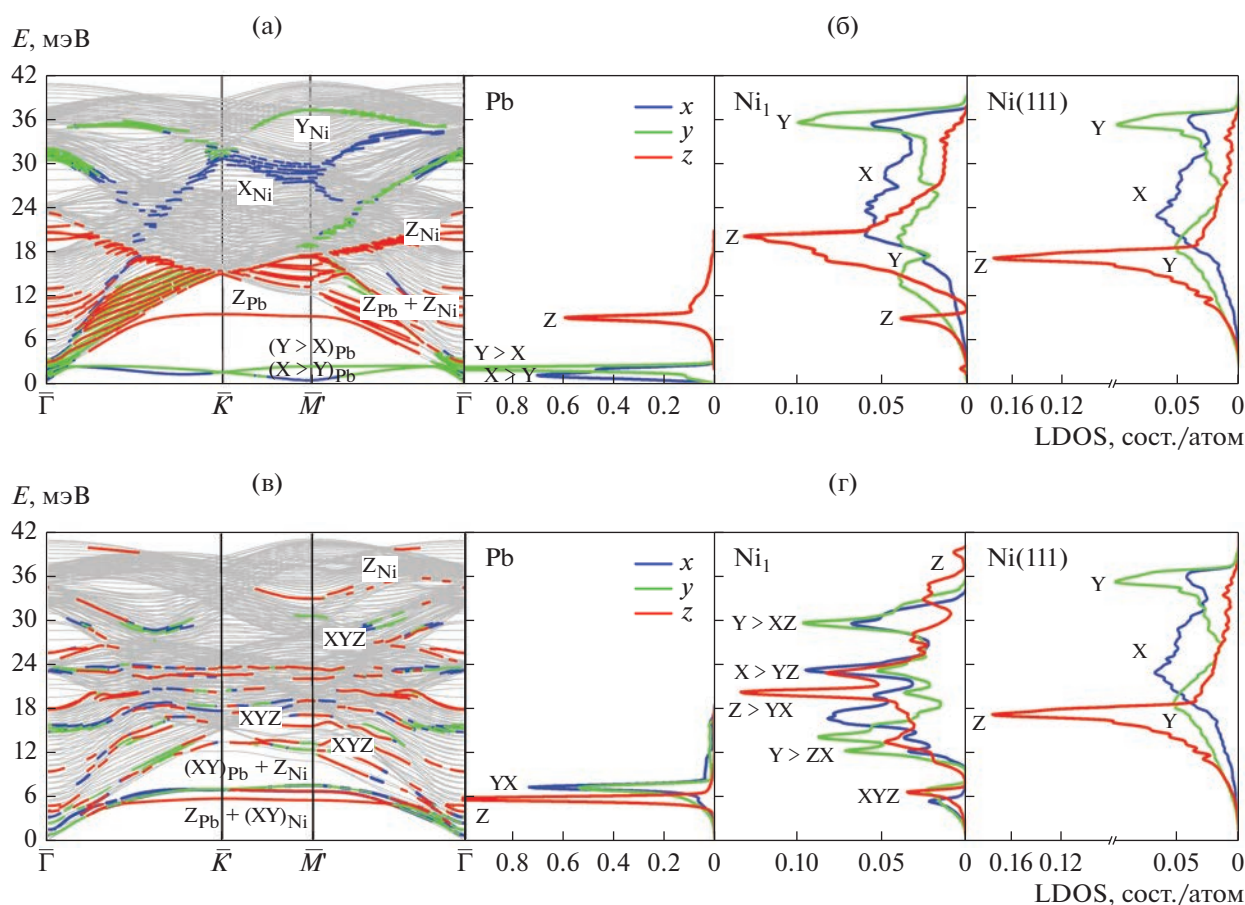


Рис. 2. Фононный спектр (а, в) и локальная плотность колебательных состояний (LDOS) поверхностных фаз Ni(111)– $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pb (б, г): а, б – адсорбционная сверхструктура и в, г – поверхностный сплав. Цветными линиями обозначены колебательные состояния, максимально локализованные на атомах Pb и в поверхностном слое Ni₁ подложки. X, Y, Z – поляризация колебательных состояний, локализованных на адатомах Pb и на атомах поверхностного слоя подложки Ni₁. В фононном спектре также показаны смешанные колебательные состояния адатомов и подложки, с соответствующей поляризацией $(XY)_{Pb} + Z_{Ni}$ и $Z_{Pb} + (XY)_{Ni}$.

страняются ниже дна проекции объемных фононов подложки. Однако теперь энергия Z-поляризованных колебаний ниже энергии XY-моды продольных колебаний. Это определяется преобладанием межатомных взаимодействий Pb–Ni в плоскости поверхностного сплава над взаимодействием Pb–Pb и Ni–Ni. В LDOS Z-моды соответствует хорошо локализованный пик при 5.8 мэВ. Следующий пик при 7.7 мэВ соотносится с X- или Y-колебаниями адатомов, которые гибридованы с Z-колебаниями поверхностных и подповерхностных атомов подложки. Эти состояния на 90% локализованы на атомах свинца, и лишь 10% приходится на атомы подложки. В точке $\bar{K}'$ состояния практически вырождены, а в точке $\bar{M}'$ они расщепляются, и энергетическая щель между ними равна 0.8 мэВ. Необходимо отметить, что для данной структуры наблюдается энерги-

ческий баланс трансляционных (адатом–адатом) и дипольно-активных (адатом–подложка) колебаний, так как они все находятся в области близких энергий. Это хорошо демонстрируется распределением состояний в фононном спектре и LDOS всей системы. Для поверхностного слоя подложки характерно появление новых Z-поляризованных колебательных состояний как в низкочастотной, так и высокочастотной области фононного спектра. Также наблюдается высокая плотность продольных колебаний атомов с Ni₁-слоя, гибридованных с вертикальными колебаниями адатомов. Сравнение с LDOS чистой поверхности Ni(111) (см. рис. 2в, 2г) показывает значительное изменение степени локализации всех колебательных состояний и их частотные сдвиги. В отличие от предыдущего случая весь спектр колебаний сжимается, что свидетельствует о более сильном взаи-

Таблица 2. Частоты локализованных колебательных состояний (мэВ) поверхности Ni(111) в симметричных точках ЗБ для структур (1×1) и $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Pb. РМ—рэлеевская мода, X, Y, Z—поляризация локализованных колебательных мод. Поляризация колебаний атомов с Ni₁-слоя и смешанных с колебаниями атомов с Ni₂-слоя пленки определяется нижними индексами 1 и 12 соответственно

Симмет. точка	Адслои Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb
$\bar{\Gamma}'(\bar{K})$ $\bar{M}'$	18.3 (PM); 30.5 (XY) ₁₂ ; 32.0 (XY) ₁ ; 20.1 (PM); 35.6 (XY) ₁ ; 37.1 (XY) ₁
Поверхностный сплав Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb	
$\bar{\Gamma}'(\bar{K})$ $\bar{M}'$	18.1 (PM); 29.5 (XYZ) ₁₂ ; 32.3 (XY) ₁ ; 20.6 (PM); 35.2 (Z) ₁₂ ; 39.7 (ZY) ₁₂
Чистая поверхность Ni(111)	
$\bar{K}$ $\bar{M}$	17.8 (PM); 30.9 (XYZ) ₁₂ ; 31.9 (XY) ₁ ; 16.5 (PM); 18.1 (X) ₁ ; 27.8 (XZ) ₁ ; 36.7 (XY) ₁

модействии адатомов и атомов поверхностных слоев подложки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе полученных данных по релаксации и колебательным свойствам поверхностной фазы Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb сделан вывод о наибольшей динамической стабильности поверхностного сплава. В случае адслоя Pb в фоновом спектре имеется низкочастотная мода продольных колебаний адатомов, определяемая их трансляционными смещениями, параллельными плоскости поверхности подложки. Критически низкое значение энергии продольной моды в точке $\bar{M}'$ на границе определяет динамическую нестабильность адслоя в направлении $[1\bar{1}0]$.

Для случая поверхностного сплава характерно усиление локализации совместных вертикальных колебаний атомов Pb и атомов подложки с подповерхностных слоев, а также повышение плотности таких колебаний. Это отражает сильное межатомное взаимодействие, как в слое сплава, так и с атомами нижележащих слоев подложки. Энергия продольной моды колебаний атомов Pb возрастает, и она попадает в область объемных колебаний подложки.

Наличие адатомов свинца, независимо от их положений на поверхности Ni(111) инициирует

появление нехарактерных низкочастотных и высокочастотных Z-колебаний в приповерхностных слоях никелевой подложки. В LDOS наблюдается размытие и высокочастотный сдвиг рэлеевской моды подложки, а также выраженная дисперсность продольных колебаний поверхностных атомов подложки вдоль всех направлений ЗБ.

Работа выполнена в рамках Госзадания для ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Woodruff D.P., Braun D., Quinn P.D., Noakes T.C.Q., Bailey P. Structure determination of surface adsorption and surface alloy phases using medium-energy ion scattering // Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B. 2001. V. 183. P. 128–139.
2. Krupski A., Nowicki M. LEED investigation of the Pb and Sb ultrathin layers deposited on the Ni(111) face at $T = 150$ – 900 K // Surf. Rev. Letters. 2003. V. 10. № 6. P. 843–848.
3. Quinn P.D., Bittencourt C., Woodruff D.P. Tensor LEED analysis of the Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb surface // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 233404–233408.
4. Li D.F., Xiao H.Y., Zu X.T., Dong H.N. First-principles study of the Ni(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°–Pb surface // Physica B. 2007. V. 392. P. 217–220.
5. Chen J.G., Menning C.A., Zellner M.B. Monolayer bimetallic surfaces: Experimental and theoretical studies of trends in electronic and chemical properties // Surf. Sci. Reports. 2008. V. 63. P. 201–254.
6. Nur M., Yamaguchi N. and Ishii F. Simple Model for Corrugation in Surface Alloys Based on First-Principles Calculations // Materials. 2020. V. 13. P. 4444–4453.
7. Rusina G.G., Borisova S.D., Ereemeev S.V., Sklyadneva I.Yu., Chulkov E.V., Benedek G., Toennies J.P. Surface Dynamic 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.
8. Rusina G.G., Borisova S.D., Chulkov E.V. Atomic structure and phonons of a Pb ultrathin film on the Al(100) surface // JETP Lett. 2014. V. 100. P. 237–241.
9. Абрикосов А.А. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987. 520 с.
10. Lin Y.-H., Hsu C.-H., Jang I., Chen C.-J., Chiu P.-M., Lin D.-S., Wu C.-T., Chuang F.-C., Chang P.-Y., and Hsu P.-J. Proximity-Effect-Induced Anisotropic Superconductivity in a Monolayer Ni–Pb Binary Alloy // CS Appl. Mater. Interfaces. 2022. V. 14. P. 23990–23997.
11. Sklyadneva I.Y., Benedek G., Chulkov E.V., Echenique P.M., Heid R., Bohnen K.-P., Toennies J.P. Mode-Selected ElectronPhonon Coupling in Superconducting Pb Nanofilms Determined from He Atom Scattering // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 095502–095506.
12. Seo M., Fushimi K., Aoki Y., Habazaki H., Inaba M., Yokomizo M., Hayakawa T., Nakayama T. In situ X-ray

- absorption spectroscopy for identification of lead species adsorbed on a nickel surface in acidic perchlorate solution // *J. Electr. Chem.* 2012. V. 671. P. 7–15.
13. *Otero R., Vazquez de Parga A.L. and Miranda R.* Observation of preferred heights in Pb nanoislands: A quantum size effect // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. P. 115401–115407.
 14. *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.
 15. *Борисова С.Д., Русина Г.Г.* Кластеры Pb на поверхности Al (001): равновесная структура и колебательные свойства // *ФММ.* 2021. Т. 122 № 11. С. 1103–1110.
 16. *Борисова С.Д., Русина Г.Г.* Атомная структура и колебательные свойства поверхности Cu(111)– $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ –Cr // *ФММ.* 2020. Т. 121. С. 1123–1128.
 17. *Levesque D., Verlet L.* Molecular Dynamic and Time Reversibility // *J. Stat. Phys.* 1993. V. 72. №3/4. P. 519–537.
 18. *Johnson R.A.* Alloy models with the embedded-atom method // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. P. 12554–12559.
 19. *Bohnen K.-P., Ho K.M.* Structure and dynamic at metal surfaces // *Surf. Sci. Rep.* 1993. V. 19. P. 99–120.
 20. *Ackland G.L., Tichy G., Vitek V., Finnis M.W.* Simple-N-body potentials for noble metals and nickel // *Phil. Mag. A.* 1985. V. 56. P. 735–756.