

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА

на правах рукописи

ДОКУКИН СЕРГЕЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ И
ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТНОГО
СПЛАВА ПЛАТИНА–МЕДЬ**

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

МОСКВА – 2020

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

**Научные
руководители:**

Салецкий Александр Михайлович,
доктор физико-математических наук, профессор,
физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова,
заведующий кафедрой общей физики

Колесников Сергей Владимирович,
кандидат физико-математических наук, доцент,
физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова,
кафедра общей физики, доцент

**Официальные
оппоненты:**

Орешко Алексей Павлович,
доктор физико-математических наук, доцент,
физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова,
кафедра физики твердого тела, профессор

Кузаков Константин Алексеевич,
доктор физико-математических наук, доцент,
кафедра физики атомного ядра и квантовой
теории столкновений, профессор

Жилиев Петр Александрович,
кандидат физико-математических наук,
Сколковский институт науки и технологий, центр
проектирования, производственных технологий
и материалов, старший научный сотрудник

Защита состоится «22» октября 2020 г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета МГУ.01.01 при Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, МГУ, физический факультет.

E-mail: laptin@polly.phys.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на сайте ИАС «ИСТИНА»: <https://istina.msu.ru/dissertations/317745189/>

Автореферат разослан «____» _____ 2020 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.ф.-м.н., доцент

Т.В. Лалтинская

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Исследование самоорганизации поверхностных сплавов полезно как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. Экспериментальные исследования формирования поверхностных сплавов дороги, с их помощью затруднительно исследовать зависимость от внешних условий и, в большинстве случаев, они не позволяют выяснить какие процессы на атомном уровне приводят к формированию сплава. Теоретическое моделирование с использованием квантовомеханических вычислений дает наиболее точные результаты, но возможно лишь для небольших систем, состоящих из нескольких десятков или сотен атомов. В связи с этим, не теряют актуальность исследования, в которых взаимодействие атомов описывается с помощью полуэмпирических потенциалов. При таком подходе появляется возможность проводить моделирование эволюции систем, по временным и пространственным характеристикам сравнимых с экспериментальными, и непосредственно наблюдать кинетику их формирования. Знание кинетики формирования сплавов помогает лучше понять взаимодействие на атомарном уровне, а знание зависимости свойств сплавов от внешних параметров позволяет лучше подобрать условия для проведения экспериментов и использования материалов в промышленности. Платина является одним из самых дорогих металлов. В связи с этим, современное использование платины в промышленности ограничено катализом различных реакций. Медь же, в свою очередь, является одним из самых дешевых цветных металлов. Поэтому внедрение атомов платины в подложку из меди выглядит перспективно с точки зрения оптимизации расходов и получения поверхностей, обладающих необычными свойствами.

Цель и задачи работы

Основной целью работы является исследование формирования и физических свойств поверхностных сплавов Pt/Cu(111) и Pt/Cu(001). В частности, были поставлены следующие задачи:

1. Подобрать параметры потенциалов межатомного взаимодействия Pt-Cu и Pt-Pt; разработать численный метод

для моделирования формирования поверхностных сплавов Pt/Cu(111) и Pt/Cu(001).

2. Исследовать атомные механизмы, динамику и условия роста пальцеобразных выростов в поверхностном сплаве Pt/Cu(111).
3. Исследовать атомные механизмы, динамику и условия роста фрактальных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(111).
4. Исследовать фазовый переход порядок-беспорядок в поверхностном сплаве Pt/Cu(001).
5. Исследовать растворение кластеров платины в поверхностном сплаве Pt/Cu(001).
6. Исследовать влияние атомов платины на электромиграцию вакансионных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(001).

Научная новизна

В работе получены следующие новые научные результаты:

1. Подобраны параметры потенциалов Розато-Жиллопа-Легранда для описания взаимодействия Pt-Pt и Cu-Pt в поверхностных сплавах Pt/Cu(111) и Pt/Cu(001). Впервые проведено моделирование формирования поверхностных сплавов Pt/Cu(111) и Pt/Cu(001) с помощью самообучающегося кинетического метода Монте-Карло.
2. Обнаружены основные диффузионные процессы, приводящие к появлению пальцеобразных выростов на ступенях на поверхности Cu(111) при напылении атомов Pt. Впервые исследована зависимость свойств пальцеобразных выростов от температуры подложки, скорости напыления атомов и концентрации атомов платины.
3. Установлены основные атомные механизмы роста фрактальных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(111).

Установлена зависимость формы и фрактальной размерности фрактальных кластеров от температуры подложки, скорости напыления атомов и концентрации атомов платины.

4. Найдена зависимость структуры поверхности сплава Pt/Cu(001) от концентрации атомов платины. Обнаружен фазовый переход порядок-беспорядок при температурах 350 и 400 К и установлена зависимость времени релаксации от концентрации атомов платины.
5. Установлена зависимость структуры кластеров, состоящих из атомов платины, в поверхности Cu(001) от времени. Установлена зависимость времен релаксации от обратной температуры и начального радиуса кластеров.
6. Установлена зависимость скорости электромиграции вакансионных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(001) от концентрации атомов платины.

Научная и практическая ценность

Представленные в работе механизмы формирования пальцевидных выростов и фрактальных кластеров в сплаве Pt/Cu(111) могут быть использованы при анализе и интерпретации экспериментов по изучению самоорганизации. Зависимость динамики самоорганизации от внешних параметров может быть использована для интерпретации экспериментальных результатов, выбора оптимальных параметров для дальнейших исследований и промышленного использования. Данные о фазовых переходах в поверхностном сплаве Pt/Cu(001) также можно использовать для выбора внешних параметров. Информация о растворении кластеров может пригодиться в дальнейших экспериментах по исследованию формирования поверхностного сплава Pt/Cu(001) для выбора оптимального времени напыления. Данные о влиянии атомов платины на электромиграцию вакансионных кластеров в поверхности Cu(001) можно использовать для уменьшения электромиграции в медных элементах интегральных микросхем.

Положения, выносимые на защиту

1. Метод моделирования самоорганизации систем на поверхности металлов типа (111).
2. Атомные механизмы, динамика и условия роста пальцеобразных выростов и фрактальных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(111).
3. Кинетика фазового перехода порядок-беспорядок в поверхностном сплаве Pt/Cu(001).
4. Динамика растворения кластеров платины в поверхностном сплаве Pt/Cu(001).
5. Зависимость скорости электромиграции вакансионных кластеров от концентрации атомов платины в поверхностном сплаве Pt/Cu(001).

Достоверность результатов

Достоверность представленных в диссертационной работе результатов подтверждается соответствием экспериментальным данным, квантовомеханическим расчетам и другим теоретическим исследованиям.

Апробация результатов

Результаты работы были представлены на следующих научных конференциях:

1. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2019», Москва, Россия, 8-12 апреля 2019
2. International Scientific Conference State-of-the-Art Trends of Scientific Research of Artificial and Natural Nanoobjects (STRANN 2018), Москва, Россия, 17-19 октября 2018
3. Математика Компьютер Образование 2018, Дубна, Россия, 29 января – 3 февраля 2018

4. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2018», Москва, Россия, 9-13 апреля 2018
5. International conference on Nanoscience + Technology (ICN+T) 2018, Brno, Czech Republic, 22-27 июля 2018
6. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2016», Москва, Россия, 11-15 апреля 2016

Публикации

По теме диссертации опубликовано 7 научных статей и тезисы к 6 докладам на научных конференциях (всего 13 печатных работ).

Личный вклад автора

Все изложенные в диссертационной работе оригинальные результаты получены автором лично, либо при его непосредственном участии. Вклад диссертанта в диссертационную работу является определяющим.

Структура и содержание работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 131 странице, включает 44 рисунка и 2 таблицы. Общее число ссылок составляет 173. В конце диссертации сформулированы основные результаты, достигнутые в ней.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, указана её научная новизна и практическая значимость, выдвинуты положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору литературы по теме диссертации. Глава начинается с обсуждения номенклатуры, используемой для описания структуры поверхностных сплавов, а также экспериментальных и теоретических методов, используемых для исследования формирования и свойств поверхностных

сплавов. Далее представлено описание экспериментальных и теоретических исследований поверхностных сплавов Pt/Cu(111) и Pt/Cu(001). В следующем разделе обсуждается формирование и свойства кластеров в поверхностных сплавах. Рассматривается литература, посвященная процессам напыления и диссоциации кластеров, формированию и свойствам фрактальных кластеров, а также электромиграции вакансионных кластеров. В последнем разделе первой главы обсуждается исследование фазовых переходов порядок-беспорядок в объемных и поверхностных сплавах.

Литературный обзор завершается постановкой задачи, основанной на анализе теоретических и экспериментальных работ по теме диссертации: она состоит в исследовании формирования и свойств пальцеобразных структур и фрактальных кластеров, формирующихся в поверхностном сплаве Pt/Cu(111), а также в исследовании фазовых переходов порядок-беспорядок, диссоциации кластеров, состоящих из атомов платины, и влиянии платины на электромиграцию вакансионных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(001). Для решения этих задач необходимо подобрать параметры потенциалов межатомного взаимодействия атомов меди и платины, а также разработать методику, позволяющую проводить моделирование формирования поверхностных сплавов.

Во **второй главе** представлено описание методики моделирования формирования поверхностных сплавов с помощью самообучающегося кинетического метода Монте-Карло (СОКММК), в котором для описания межатомного взаимодействия используется модифицированный потенциал Розато-Жиллопа-Легранда. Для вычисления диффузионных барьеров в СОКММК использован метод упругой ленты, а для ускорения – численный метод, основанный на методе средней частоты. Также в главе описаны основные идеи, лежащие в основе поиска оптимальных параметров потенциалов для описания межатомного взаимодействия атомов меди и платины.

В **третьей главе** рассматривается формирование и физические свойства пальцеобразных выростов, образующихся при напылении атомов платины на ступенчатую поверхность Cu(111).

Напыление атомов платины на ступенчатую поверхность

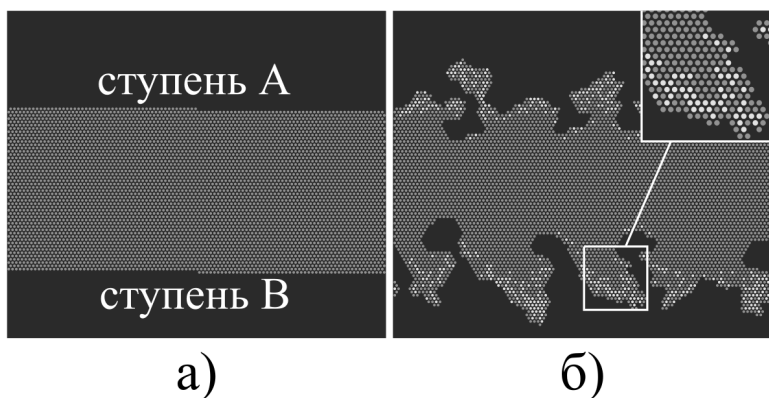


Рис. 1: Вид сверху на вычислительную ячейку при температуре 315 К и скорости напыления атомов платины 0,0025 МС/с: а) начальная конфигурация, б) конфигурация после напыления 0,05 МС атомов платины. Серым цветом обозначены атомы меди. Белым цветом обозначены атомы платины.

Cu(111) приводит к росту пальцеобразных выростов как возле ступеней А, так и возле ступеней В (Рисунок 1). Для исследования свойств пальцеобразных выростов в работе используется такой параметр как относительная длина ступени, равная отношению средней длины ступени после напыления атомов платины к её начальной длине. В работе показано, что относительная длина ступени увеличивается при увеличении концентрации атомов платины. Относительная длина ступени В больше, чем относительная длина ступени А. Было рассмотрено формирование сплава при скоростях напыления атомов платины 0,001 – 0,01 МС/с и температурах 285 – 345 К. Показано, что относительная длина ступени увеличивается при увеличении температуры и уменьшается при увеличении скорости напыления атомов платины. Также показано, что относительное число атомов платины, расположенных на расстоянии вторых ближайших соседей, больше, чем относительное число атомов платины, расположенных на расстоянии

третьих ближайших соседей.

Далее обсуждается кинетика формирования сплава. Наиболее вероятным является следующий механизм роста пальцеобразных выростов. После напыления на поверхность $\text{Cu}(111)$ атом платины подходит к ступени, погружается в неё и через некоторое время полностью окружается атомами меди. Данная совокупность событий приводит к появлению выступов на ступени, являющихся основой для формирования пальцеобразных выростов. Недалеко от атома платины, погруженного в ступень и окруженного атомами меди, к ступени может подойти второй атом платины, который либо сразу окружается атомами меди, либо погружается в ступень. Вероятность первого события больше, чем второго, поэтому число атомов платины, расположенных на расстоянии вторых ближайших соседей, больше, чем число атомов платины, расположенных на расстоянии третьих ближайших соседей.

В конце главы обсуждается применение разработанного метода ускорения СОКММК моделирования к моделированию формирования поверхностного сплава $\text{Pt}/\text{Cu}(111)$. Показано, что использование метода ускорения приводит к увеличению скорости моделирования более чем в 5000 раз. Скорость работы метода существенно зависит от размера системы. В связи с этим СОКММК моделирование оказывается наиболее эффективным на промежуточном этапе моделирования, когда уже известны величины всех диффузионных барьеров, но возле ступеней еще не настолько много атомов платины, чтобы было необходимо применять алгоритм ускорения к большим системам.

Четвертая глава посвящена результатам исследования формирования фрактальных кластеров в сплаве $\text{Pt}/\text{Cu}(111)$.

В работе рассматривается формирование фрактальных кластеров при скоростях напыления атомов платины 0,001–1 МС/с, температурах подложки 200 и 300 К и относительной концентрации атомов платины 0 – 1 (Рисунок 2). При скорости напыления атомов 0,025 МС/с, температуре 300 К и относительной концентрации атомов платины 0.8 фрактальный кластер, полученный при моделировании, похож на фрактальный кластер, обнаруженный в экспериментальном исследовании с помощью сканирующего туннельного микроскопа (Рисунок 2 б). Обнаружено,

что форма кластера слабо зависит от скорости напыления атомов платины, но существенно зависит от температуры. При температуре 200 К как кластеры, состоящие только из атомов меди, так и кластеры, состоящие только из атомов платины, обладают осью симметрии третьего порядка. При температуре 300 К кластеры, состоящие только из атомов платины, также обладают осью симметрии третьего порядка, но кластеры, состоящие только из атомов меди, обладают осью симметрии шестого порядка. Форма гетерогенных кластеров, состоящих как из атомов меди, так и из атомов платины, похожа на форму гомогенных кластеров, но гетерогенные кластеры более разветвленные, чем гомогенные. При температуре 200 К кластеры являются более разветвленными, чем при температуре 300 К.

Для количественного описания формы кластеров в работе используются два параметра. Первый параметр – фрактальная размерность. При вычислении фрактальной размерности рассматриваемых в работе фрактальных кластеров получается довольно большая погрешность в связи с тем, что они не являются фракталами в строго математическом смысле. Для более точного определения фрактальной размерности рассматриваются три метода вычисления фрактальной размерности: согласно определению Колмогорова [2, 3], с помощью исследования зависимости массы кластера от его радиуса [4, 5], и с помощью вычисления корреляционных функций [5, 6]. Второй параметр, используемый в работе для количественного описания формы кластеров, – относительная длина границы кластера. Она равна отношению числа граничных атомов к полному числу атомов в кластере. Использование относительной длины границы позволяет отличать некомпактные кластеры от компактных, если фрактальная размерность и тех, и других равна 2.

Для аппроксимации величины фрактальной размерности в работе используется обобщенная модель диффузионно-лимитированного роста (ОДЛР). Основным отличием обобщенной модели от обычной является то, что после присоединения к кластеру атом не останавливается, а продолжает перемещаться вдоль границы кластера с эффективным диффузионным барьером. Изменение относительной концентрации атомов платины

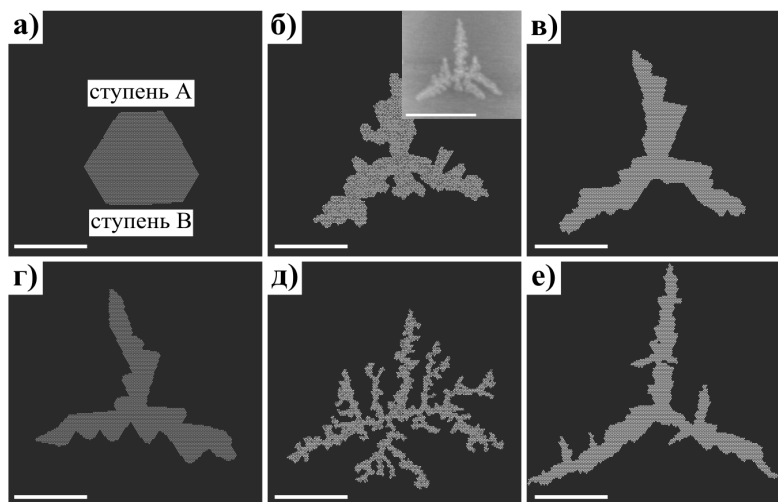


Рис. 2: Вид сверху на вычислительную ячейку после напыления 4000 атомов при скорости напыления атомов $0,025 \text{ МС/с}$ и температурах подложки 300 К (а–в) и 200 К (г–е). Относительная концентрация атомов платины на Рисунках (а,г) равна 0, (б,д) – 0,8, (в,е) – 1,0. Длина масштабной линейки равна 10 нм. Серые шарики символизируют атомы меди, а белые – атомы платины. Рисунок на вставке на Рисунке (б) взят из экспериментальной работы [1]. Длина масштабной линейки на вставке равна 50 нм.

приводит к изменению величины эффективного диффузионного барьера. Учет данной зависимости позволил провести вычисление фрактальной размерности для всех фрактальных кластеров, рассмотренных в работе.

В конце главы обсуждается кинетика формирования фрактальных кластеров. Показывается, что форма гомогенных кластеров определяется анизотропией диффузионных барьеров для огибания углов между ступенями А и В. Форма гетерогенных фрактальных кластеров определяется как анизотропией барьеров, так и притяжением атомов платины и меди в поверхностном

сплаве Pt/Cu(111).

В пятой главе обсуждается формирование поверхностного сплава Pt/Cu(001). В связи с тем, что после напыления на поверхность Cu(001) атом платины в неё погружается, было рассмотрено формирование сплава в верхнем слое подложки.

Сначала обсуждается формирование поверхностного сплава при температурах 300, 350 и 400 К и концентрациях атомов платины меньших 0,5 МС. Для анализа структуры сплава вычислялось значение парной корреляционной функции атомов платины. Обнаружено, что при малых концентрациях атомов платины ($< 0,1$ МС) происходит формирование неупорядоченного сплава. При увеличении концентрации атомов платины ($0,1 \text{ МС} \leq n_{Pt} < 0,3 \text{ МС}$) происходит формирование сплава, в котором преобладают структуры, состоящие из атомов платины, расположенных на расстоянии вторых ближайших соседей. Если температура $T > 350$ К, то дальнейшее увеличение концентрации атомов платины ($0,3 \text{ МС} \leq n_{Pt} \leq 0,5 \text{ МС}$) приводит к формированию структуры с дальним порядком в результате фазового перехода порядок-беспорядок (Рисунок 3).

Далее была рассмотрена диссоциация кластеров, состоящих из атомов платины в поверхности Cu(001). Так как атомам платины в поверхности Cu(001) энергетически выгодно быть окруженными атомами меди, то кластер, состоящий из атомов платины, начинает постепенно растворяться. После начального расширения кластера формируется несколько характерных областей: в центре кластера находится «плотное ядро», в котором атомы платины расположены на расстоянии первых или вторых ближайших соседей, дальше от центра находится «рыхлая структура», в которой атомы платины расположены на расстоянии вторых или третьих ближайших соседей, и на периферии кластера атомы платины расположены неупорядоченно. Исследование показало, что радиусы плотного ядра и рыхлой структуры со временем линейно уменьшаются. В работе показано, что данный эффект можно объяснить в простейшей модели растворения. Радиус периферии кластера увеличивается пропорционально корню времени. Данная зависимость связана с тем, что атомы платины на периферии кластера ведут себя подобно броуновским части-

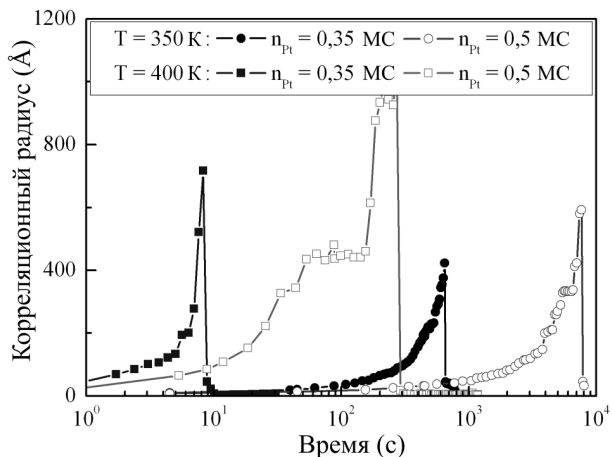


Рис. 3: Временная зависимость корреляционного радиуса при 350 К и 400 К, концентрации атомов платины 0,35 МС и 0,5 МС.

цам. Также в работе показано, что время растворения кластера экспоненциально зависит от обратной температуры и начального радиуса кластера.

В конце главы обсуждается влияние атомов платины на электромиграцию вакансионных кластеров в поверхности $\text{Cu}(001)$. Между вакансионными кластерами и атомами платины действуют силы отталкивания. Так как атомы платины перемещаются в поверхности $\text{Cu}(001)$ относительно медленно, то вакансионным кластерам приходится обходить атомы платины, что приводит к уменьшению скорости диффузии вакансионных кластеров с ростом концентрации атомов платины. При концентрации атомов платины порядка 0,1 МС скорость электромиграции вакансионных кластеров в поверхности $\text{Cu}(001)$ уменьшается практически до нуля.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы.

Литература

- [1] Formation of Pt and Rh Nanoclusters on a Graphene Moiré Pattern on Cu(111) / E. Soy, Z. Liang, M. Trenary // J. Phys. Chem. C. — 2015. — № 119. — С. 24796–24803.
- [2] The dimension of chaotic attractors / J. Farmer, E. Ott, J. A. Yorke // Physica D. — 1983. — № 7. — С. 153 – 180.
- [3] A new metric invariant of transient dynamical systems and automorphisms in Lebesgue spaces / A. N. Kolmogorov // Dokl. Akad. Nauk SSSR. — 1958. — № 119. — С. 861 – 864.
- [4] Dendritic to non-dendritic transitions in Au islands investigated by scanning tunneling microscopy and Monte Carlo simulations / S. Ogura, K. Fukutani, M. Matsumoto и др. // Phys. Rev. B. — 2006. — № 73. — С. 125442.
- [5] Fractal Growth Phenomena / T. Vicsek. — 2nd edition. — World Scientific, 1992.
- [6] Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon / T. A. Witten, L. M. Sander // Phys. Rev. Lett. — 1981. — № 47. — С. 1400–1403.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Определены параметры потенциалов Розато-Жиллопа-Легранда для описания взаимодействия Pt-Pt и Cu-Pt в поверхностных сплавах Pt/Cu(111) и Pt/Cu(001). На основе самообучающегося кинетического метода Монте-Карло, метода упругой ленты и метода средней частоты разработан комплекс программ для моделирования эволюции системы атомов на поверхности металла. Предложен метод ускорения, увеличивающий скорость моделирования формирования поверхностного сплава более чем в 5000 раз по сравнению с обычным СОКММК моделированием.
2. Объяснено формирование на ступенях пальцеобразных выростов в поверхностном сплаве Pt/Cu(111) при температурах подложки 285 – 345 К и скоростях напыления атомов Pt 0,001 – 0,01 МС/с. Выявлены основные диффузионные процессы, приводящие к появлению пальцеобразных выростов на ступенях. Исследована зависимость свойств пальцеобразных выростов от температуры подложки, скорости напыления атомов и концентрации атомов платины. Установлено, что при увеличении концентрации атомов платины и температуры подложки длина пальцеобразных выростов монотонно увеличивается, а при увеличении скорости напыления атомов платины длина пальцеобразных выростов монотонно уменьшается. Обнаружено, что число атомов платины, расположенных на расстоянии вторых соседей больше, чем число атомов платины, расположенных на расстоянии третьих ближайших соседей.
3. Объяснено формирование фрактальных кластеров, состоящих из атомов меди и платины, на поверхности Cu(111) при температурах подложки 100 – 325 К, скоростях напыления атомов 0,001 – 1 МС/с и относительной концентрации атомов платины 0 – 1. Установлено, что фрактальная размерность кластеров слабо зависит от скорости напыления атомов, монотонно увеличивается с ростом температуры и достигает минимума при относительной концентрации атомов платины 0,6 (0,4) при температуре подложки 200 К (300 К). Представлено обобщение ОДЛР для бинарного сплава. Показано, что для полноценного описания формы фрактального кластера необходимо знать не только его фрактальную размерность, но и относительную длину его границы. Установлены основные атомные механизмы роста фрактальных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(111).

4. Обнаружен фазовый переход порядок-беспорядок в поверхностном сплаве Pt/Cu(001). Найдена зависимость распределения атомов платины в поверхности Cu(001) от концентрации атомов платины. Обнаружена экспоненциальная зависимость времени релаксации от концентрации атомов платины при температурах подложки 350 и 400 К.
5. Исследована диссоциация кластеров, состоящих из атомов платины, в поверхности Cu(001). Обнаружено наличие трех характерных областей внутри кластера во время его растворения. Установлено, что размер кластера увеличивается пропорционально корню от времени, в то время как внутренняя часть кластера уменьшается пропорционально времени. Показано, что время растворения кластера экспоненциально зависят от обратной температуры и начального радиуса кластера.
6. Исследована электромиграция вакансионных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(001). Установлено, что скорость электромиграции монотонно уменьшается с увеличением концентрации атомов платины. Показано, что при увеличении концентрации атомов платины до 0,04 МС скорость электромиграции уменьшается в 10 раз.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

По теме диссертации были опубликованы следующие статьи:

В журналах, индексируемых в WoS и попадающих в первый квартиль:

1. Growth of the Pt/Cu(111) surface alloy: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations / S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk // Journal of Alloys and Compounds. – 2018. – № 763. – С. 719–727. Импакт-фактор: 4,65 (Web of Science)

В журналах, индексируемых в WoS, но не попадающих в первый квартиль:

2. Efficient energy basin finding method for atomistic kinetic Monte Carlo models / Dokukin S. A., Kolesnikov S. V., Saletsky A. M. // Computational Materials Science. – 2018. – № 155. – С. 209–215. Импакт-фактор: 2,863 (Web of Science)

3. Diffusion-mediated processes in Pt/Cu(001) surface alloy / S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk // Surface Science. – 2020. – № 692. – С. 121515. Импакт-фактор: 1,466 (Web of Science)
4. Dendritic growth of the Pt–Cu islands on Cu(111) surface: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations / Dokukin S. A., Kolesnikov S. V., Saletsky A. M. // Surface Science. – 2019. – № 689. – С. 121464. Импакт-фактор: 1,466 (Web of Science)

В журналах, индексируемых в Scopus:

5. Semiempirical potentials for Pt/Cu(100) surface alloy investigation / S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk // AIP Conference Proceedings. – 2019. – № 2064 – С. 030003–1–030003–7. Импакт-фактор: 0,6 (Scopus)

В журналах, индексируемых в RSCI:

6. Диффузия димеров атомов при формировании поверхностного сплава Pt/Cu(111) / Докукин С. А., Колесников С. В., Салецкий А. М. // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. – 2019. – № 4. – С. 46–51. Импакт-фактор: 1,01 (РИНЦ)
7. Кинетический метод Монте-Карло: математические основы и приложения к физике низкоразмерных наноструктур / С. В. Колесников, А. М. Салецкий, С. А. Докукин, А. Л. Клавсюк // Математическое моделирование. – 2018. – № 30 – С. 48–80. Импакт-фактор: 0,929 (РИНЦ)

По теме диссертации были опубликованы следующие тезисы:

1. Исследование роста дендритов при формировании поверхностного сплава Pt/Cu(111) / Докукин С.А. // Материалы международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2019»
2. Semiempirical potentials for Pt/Cu(100) surface alloy investigation / Dokukin S.A., Kolesnikov S.V., Saletsky A.M., Klavsyuk A.L. // Abstracts for the International Scientific Conference State-of-the-Art Trends of Scientific Research of Artificial and Natural Nanoobjects (STRANN 2018)
3. Исследование формирования поверхностного сплава Pt-Cu с помощью метода самообучающегося кинетического Монте Карло / Докукин С.А., Колесников С.В., Салецкий А.М., Клавсюк А.Л. // Тезисы конференции Математика Компьютер Образование 2018
4. Моделирование формирования поверхностного сплава Pt/Cu(111) методом самообучающегося кинетического Монте Карло / Докукин С.А. // Материалы международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2018»
5. Growth of Pt/Cu(111) surface alloy: fitting of the interatomic potentials and kinetic Monte Carlo simulation / Kolesnikov S.V., Dokukin S.A., Klavsyuk A.L., Saletsky A.M. // International conference on Nanoscience + Technology (ICN+T) 2018 Abstract book
6. Теоретическое исследование формирования поверхностного сплава платина-медь / Докукин С.А. // Материалы международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2016»