

# **ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«Перспективные материалы с иерархической структурой  
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

1

DOI: 10.17223/9785946217408/121

**АТОМНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И ВИБРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА МАЛЫХ  
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ НА ПОВЕРХНОСТИ CU(111)**

<sup>1,2</sup>Русина Г.Г., <sup>1,2</sup>Борисова С.Д.

<sup>1</sup>*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

<sup>2</sup>*Томский государственный университет, Томск, Россия*

Влияние малых атомных кластеров на поверхностные свойства металлов вызывает значительный научный интерес [1,2]. В частности, из-за несоответствия периода решетки кластера и подложки, релаксация поверхности с кластером может приводить к деформации поверхностной структуры и межатомных связей и, следовательно, к изменению поверхностных свойств подложки. В частности, при формировании на поверхности меди кластеров Al происходит модификация её механических свойств. При концентрациях Al до 10 ат. % формируются упорядоченные твёрдые растворы.

С использованием межатомных потенциалов взаимодействия, полученных в приближении сильной связи, проведено исследование релаксации и колебательных свойств как кластеров Cu, Cr и Al, так и поверхности (111) медной подложки. Показано, что кластеры создают области локальных сжатий и растяжений поверхности подложки. Размеры областей локальных изменений структуры подложки зависят от размера и материала кластера. Наиболее значительное влияние испытывают атомы подложки близкие к краевым атомам кластера. Также показано, что присутствие малых кластеров приводит к модификации колебательных состояний подложки, сдвигу частоты релеевской моды на величину, зависящую от размера и материала кластера, а также к возбуждению новых Z-поляризованных колебательных мод поверхностных атомов меди. Эти моды всегда смешиваются с колебаниями кластера, формируя низкочастотные FT-и FR-моды (frustrated translation and frustrated rotation modes) несостоявшихся трансляций и поворотов и высокочастотные гибридные моды, направленные перпендикулярно подложке и называемые strength modes.

**Литература**

1. Diehl R.D., McGrath R. Structural study of alkali metal adsorption and coadsorption on metal surfaces // Surface Sci. Rep. 1996. V. 23. P. 43-171.
2. Ливанов Н.А., Степанюк В.С., Хергер В., Канцельсон А.А., Мороз А.Э., Коко К. Структура и стабильность кластеров на поверхностях металлов // ФТТ. 2007. Т. 4. С. 1329-1334.