Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 2, с. 82 – 88 © 2021 г. 25 июля

Структурная релаксация и колебательные свойства поверхности с точечными дефектами

Г. Г. Русина[+1)], *С. Д. Борисова*[+1)], *Е. В. Чулков*[*]

[+]*Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, 634021 Томск, Россия*

[*]*Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain*

Поступила в редакцию 15 июня 2021 г.
После переработки 19 июня 2021 г.
Принята к публикации 21 июня 2021 г.

Представлены результаты теоретического исследования локальных структурных изменений и вибрационных характеристик поверхности (001) ГЦК металла в присутствии точечных дефектов (вакансия/адатом). Показано влияние размера вакансионного дефекта и положения в нем адатома на характер структурной релаксации и фононные состояния поверхности. Определена наиболее динамически стабильная конфигурация в комплексе точечных дефектов "вакансия/адатом". Анализ проводился на основе данных по равновесной атомной конфигурации, локальной плотности фононных состояний и поляризации локализованных колебательных мод. Все расчеты проводились с использованием межатомных потенциалов, получаемых в рамках метода погруженного атома.

DOI: 10.31857/S1234567821140068

Представления о дефектности атомной и электронной структуры поверхности лежат в основе описания процессов физико-химических взаимодействий с участием поверхности твердых тел. Даже в относительно небольших количествах поверхностные дефекты могут влиять на электронные, магнитные, механические свойства поверхности и играть преобладающую роль во многих поверхностных процессах [1–5]. Высокая чувствительность современных технологий в субмикронном масштабе способствовала возможности разработки новых современных материалов с уменьшенной размерностью, в которых поверхностные явления играют определяющую роль. Понимание и контроль характеристик дефектов в широком классе современных наноструктур вполне могут стать ключом к прорывам в важнейших областях науки и техники. Например, аккуратными манипуляциями распределением и концентрацией вакансий и адатомов на поверхности можно управлять широким набором свойств низкоразмерных материалов [1, 6, 7]. Основная трудность для интенсивного развития "дефектной" инженерии поверхности связана с визуализацией точечных дефектов [2]. Однако, благодаря исследованию влияния, которое точечные дефекты оказывают на свойства поверхности, становится возможным определение их положения, размеров и концентрации [2, 8–10]. Одним из возможных способов обнаружения и описания точечных дефектов является исследование локальных изменений фононного спектра поверхности, поскольку изменение силового взаимодействия вокруг вакансии или адатома отражается на колебаниях поверхностных атомов, ближайших к дефекту [11–13, 16]. И, хотя вопросы влияния точечных дефектов на фононы появились в фокусе интересов сравнительно давно [13, 14], однако в настоящее время акцент сместился в сторону влияния дефектов на фононы в наноразмерных объектах. Интенсивное исследование этого вопроса началось относительно недавно, что, безусловно, связано с развитием сверхчувствительных экспериментальных методов исследования атомной структуры и поверхностных фононов (таких как сканирующая туннельная микроскопия в комбинации с неупругой электронной туннельной спектроскопией) [15–17], а также с появлением более совершенных методов теоретического исследования. Пример успешного сочетания эксперимента и модельных теоретических расчетов в исследовании локальных динамических характеристик дефектной поверхности продемонстрирован в работах [17, 16]. Использование модельного подхода в данном случае является оправданным, так как для расчетов требуются ячейки больших размеров, содержащие сотни атомов, что при *ab initio* рас-

[1)]e-mail: rusina@ispms.tsc.ru; svbor@mail.ru

четах приводит к значительным временным и компьютерным затратам.

Целью настоящей работы является исследование равновесной атомной и фононной структуры поверхности (001) ГЦК металла при наличии на ней комплексов точечных дефектов (вакансия/адатом). В качестве материала подложки выбрано серебро, а адсорбатом является натрий, в силу своего выраженного влияния на поверхностные свойства металлов (значительная разница атомных радиусов и масс, перенос заряда в подложку, изменение работы выхода и пр.). Для достижения поставленной цели были проведены расчеты атомной релаксации поверхности, распределения локальной плотности колебательных состояний, в зависимости от размеров вакансионного "кластера" и положения адатома в нем.

Для определения равновесной кристаллической структуры и вибрационных свойств поверхности с точечными дефектами в работе использовались потенциалы межатомного взаимодействия, полученные в рамках метода погруженного атома [18]. Метод хорошо себя зарекомендовал в исследованиях структурных и динамических характеристик поверхностей с адатомами [19-21]. Оптимизация структуры проводилась методом молекулярной динамики при нулевой температуре, с использованием скоростной схемы Верлета (временной шаг $h = 1 \cdot 10^{-14}$ с) [22]. Поверхность Ag(001) моделировалась 31-слойной пленкой, а размеры двумерной элементарной ячейки выбирались в соответствии с величиной точечного дефекта: (4×4) для моновакансии, а (6×6) для 4-х и 9-ти атомного вакансионного "кластера". Собственные значения частот колебаний и векторов поляризации рассчитывались из динамической матрицы. Локальная плотность колебательных состояний (LDOS – *local density of states*) определялась проекцией этих собственных значений на интересующий атом в направлениях X, Y, Z. Количество атомов, входящих в расчетную ячейку, варьировалось от 496 до 900.

Рассчитанные значения вертикальной релаксации идеальной поверхности Ag(001) $\Delta_{12} = -1.9\,\%$, $\Delta_{23} = -0.02\,\%$ находятся в хорошем согласии с данными эксперимента $\Delta_{12} = -1.5\,\%$, $\Delta_{23} = 0.1\,\%$ [24] и DFT расчета $\Delta_{12} = -2.1\,\%$, $\Delta_{23} = +0.10\,\%$ [25]. Латеральная релаксация данной поверхности отсутствует. В отличие от идеальной поверхности Ag(001), наличие в поверхностном слое моновакансии или вакансионного "кластера" приводит к появлению латеральной релаксации в приповерхностных слоях. На рисунке 1a–3a на верхней панели представлены геометрические модели поверхности Ag(001) с разным размером вакансионного "кластера" и направления латеральных смещений атомов. Схемы вертикальной релаксации, с затуханием на 4 приповерхностном слое, показаны на нижней панели. Ag_s, Ag_{s-1}, Ag_{s-2} обозначают слои от поверхности и далее вглубь пленки. В каждом слое атомы можно разделить на две группы: I – группа это атомы, ближайшие к границе вакансии (NN – *nearest neighbors*), II группа – все остальные атомы слоя. Из рисунков 1–3 видно, что латеральные смещения атомов I группы в Ag_s и Ag_{s-1} слоях имеют противоположные направления, что создает локальные области деформаций: растягивающих в Ag_s и сжимающих в Ag_{s-1} слоях. Увеличение размеров вакансии приводит к расширению области локальных деформаций в Ag_s и Ag_{s-1} слоях, а также вовлечению в этот процесс Ag_{s-2} слоя. При вертикальной релаксации имеют место два процесса: локальная релаксация в окрестности дефекта и планарная релаксация. Это приводит к разной величине вертикальных смещений атомов I и II групп и, как следствие, к появлению коробления δ_z атомной структуры в Ag_{s-1} и Ag_{s-2} слоях. Для всех размеров вакансионного дефекта максимальное коробление характерно для Ag_{s-2} слоя и $\delta_z = 0.04\,\text{Å}$, $\delta_z = 0.07\,\text{Å}$ и $\delta_z = 0.08$,Åсоответственно для 1, 4, 9 атомных вакансий. Значения вертикальной релаксации приведены в табл. 1. Как видно из таблицы,

Таблица 1. Вертикальная релаксация поверхности Ag(001) с n-вакансионными "кластерами" (n = 1, 4, 9). Положительные (отрицательные) значения у Δ_{ij} (%) означают расширение (сжатие) межплоскостных растояний, Δ^v_{ij} – для атомов слоя вблизи вакансии и Δ_{ij} - для всех остальных атомов слоя

Поверхность	Δ_{12}	Δ^v_{12}	Δ_{23}	Δ^v_{23}	Δ_{34}	Δ^v_{34}
+1 вакансия	−2.0	−4.7	−0.8	+1.0	−0.1	+0.5
+4 вакансия	−1.8	−5.4	−0.3	+0.9	−0.2	+0.6
+9 вакансия	−1.6	−5.6	−0.1	+0.4	−0.4	+0.9

релаксация Ag_s слоя для I группы атомов более чем в ~ 2 раза превышает релаксацию II группы атомов. Общим является знакопеременный характер релаксации поверхности с 4-х и 9-ти атомными вакансиями. Такой осциллирующий характер вертикальной релаксации свойственен для вицинальных поверхностей ГЦК металлов и отражает появление моноатомной ступени на границе вакансионного "кластера" [26].

Элементарным ячейкам (4×4) и (6×6) соответствуют двумерные зоны Бриллюэна (ЗБ), которые меньше ЗБ исходной ячейки (1×1) в 16 и 36 раз соответственно. Это приводит к многократным отражениям дисперсионных кривых в точку в $\bar{\Gamma}$, а так-

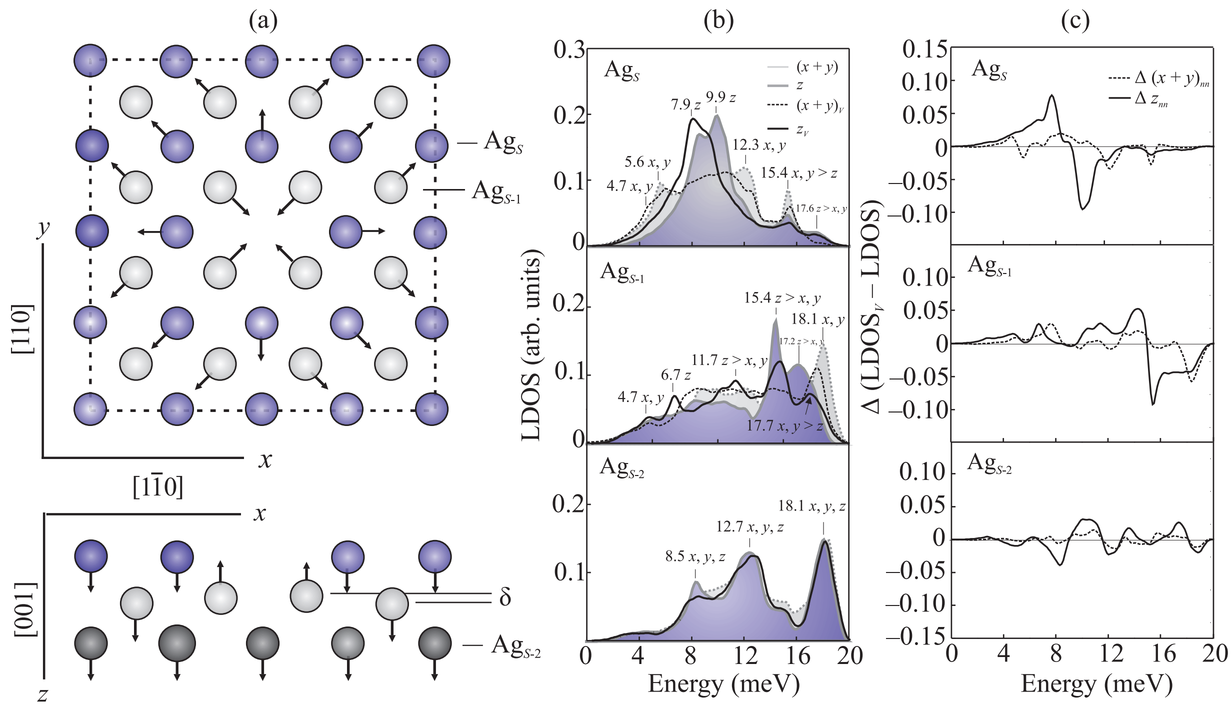

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Геометрическая модель поверхности Ag(001) с моновакансией и релаксационные смещения ближайших атомов. Верхняя панель – латеральные смещения, нижняя панель – вертикальные смещения. Расчетная ячейка обозначена пунктирной линией. (b) – LDOS поверхности Ag(001) с моновакансией в сравнении с LDOS бездефектной поверхности (окрашенная область). (c) – Разность Δ(LDOS$_v$-LDOS) для ближайших к дефекту атомов при конкретном значении энергии колебаний

же в симметричные точки $\bar{\mathrm{X}}$ и $\bar{\mathrm{M}}$ новой ЗБ. Следствием таких отражений является размытие локализованных мод и трудность выделения новых состояний, инициированных вакансиями. Поэтому для анализа локальных изменений в фононной структуре поверхности Ag(001) наиболее информативными являются расчеты локальной плотности колебательных состояний бездефектной поверхности (LDOS) и поверхности с вакансиями (LDOS$_v$), а также их разностной плотности ΔLDOS. Соответствующие LDOS представлены на рис. 1b, c. Как видно из рис. 1b наличие одиночной вакансии в Ag$_s$ слое не приводит к кардинальным изменениям в полной LDOS. Все локализованные состояния сохраняются и только для рэлеевской моды (*Rayleigh mode* – RW) характерно снижение энергии и локализации на 2.0 мэВ и $\sim$ 10–15 % соответственно. Также наблюдается увеличение амплитуды низкочастотных поверхностных X, Y-колебаний, что приводит к снижению их частоты на $\sim$0.4 мэВ. Наиболее наглядно локальные изменения в фононной структуре, вносимые дефектом, представлены в ΔLDOS (см. рис. c). При расчете ΔLDOS учитывались колебательные состояния только ближайших к n-вакансионному "кластеру" атомов. Как можно видеть из рис. 1c, для Ag$_s$ слоя становится более выраженной разница в степени локализации X, Y-колебаний, распространяющихся в области запрещенных частот объемного фононного спектра. В низкочастотной области, при 4.7 мэВ, обнаруживается продольный резонанс, гибридизованный с вновь появившимися низкочастотными Z-колебаниями атомов Ag$_{s-1}$ слоя. Наиболее заметные изменения наблюдаются в ΔLDOS Ag$_{s-1}$ слоя. Для высокочастотных колебаний характерна делокализация (уменьшение на 45 %) и низкочастотный сдвиг на $\sim$0.5 мэВ. Кроме того, в Ag$_{s-1}$ слое появляется новое состояние дипольного типа с энергией 6.7 мэВ, которое определяется совместными Z-колебаниями ближайших к вакансии атомов с Ag$_s$, Ag$_{s-1}$ и Ag$_{s-2}$ слоев. В ΔLDOS для Ag$_{s-2}$ слоя все состояния сохраняют свою энергию, поляризацию и имеется лишь незначительная делокализация продольных колебаний.

Полная LDOS и ΔLDOS для поверхности с 4-х атомным вакансионным "кластером" представлены на рис. 2b, c. В полной LDOS для Ag$_s$ слоя сохраняется низкочастотный сдвиг RW и продольных X, Y-колебаний, распространяющихся в плоскости поверхности вдоль [110] направления. В ΔLDOS наиболее заметные изменения наблюдаются в Ag$_{s-1}$ слое.

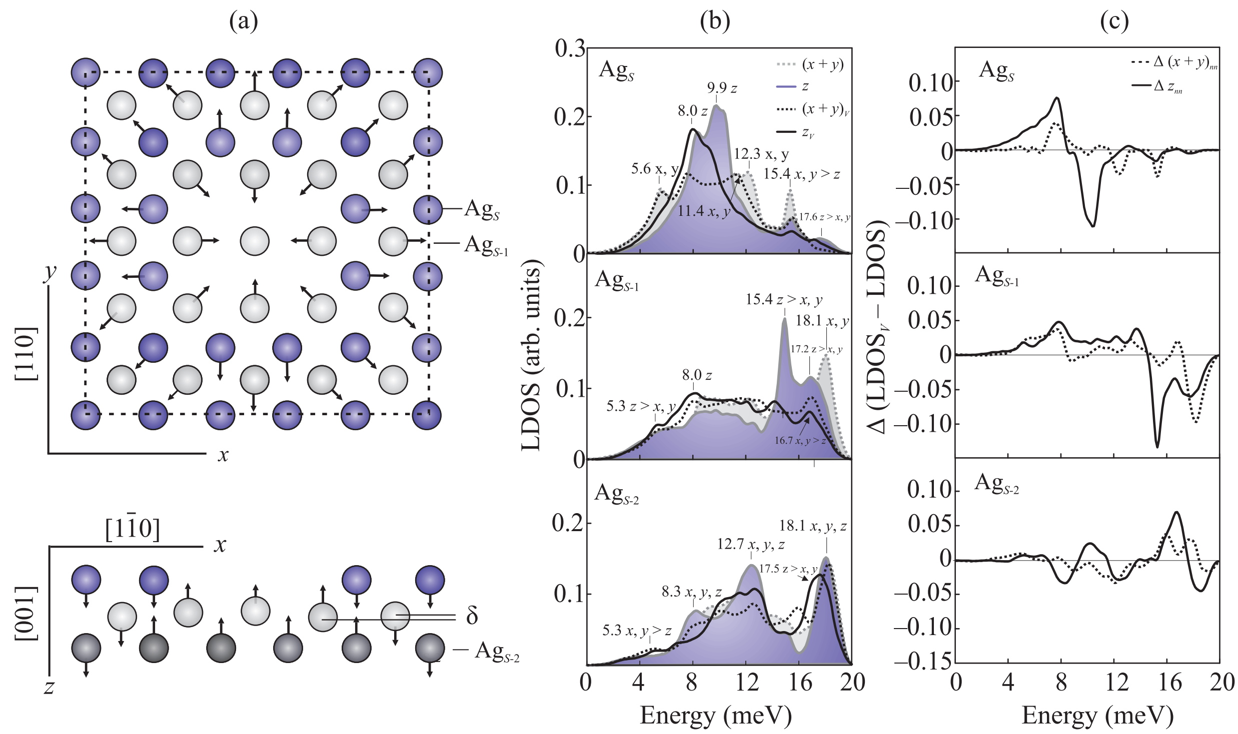

Рис. 2. (Цветной онлайн) (a)–(c) – То же, что на рис. 1, но для 4-х атомного вакансионного "кластера"

Локализация высокочастотных Z-колебаний снижается на $\sim 72\,\%$ вследствии гибридизации с XY-колебаниями атомов с Ag_s и Ag_{s-2} слоев. В отличие от поверхности с моновакансией, в ΔLDOS Ag_{s-2} слоя наблюдается частотный сдвиг и снижение локализации всех Z-поляризованных колебаний. Совместные вертикальные колебания атомов с Ag_s и Ag_{s-1} слоев становятся более локализованными и приобретают псевдорэлеевский характер. При этом атомы Ag_{s-1} слоя смещаются строго в сагиттальной плоскости с ZY поляризацией, а атомы Ag_s слоя имеют выраженную Z-поляризацию. При энергии 3.7 мэВ появляется новое, дважды вырожденное состояние, с взаимно меняющейся X и Y-поляризацией. Оно максимально локализовано в Ag_s и Ag_{s-2} слоях и определяется различием во взаимодействии продольных колебаний атомов в окрестности формирующихся ступени и террасы с вертикальными колебаниями атомов Ag_{s-1} слоя.

LDOS и ΔLDOS для поверхности с 9-ти атомным вакансионным "кластером" представлены на рис. 3b, c. Сравнение с LDOS и ΔLDOS поверхности с 1- и 4-х атомными вакансиями показывает, что при увеличении размеров вакансионного дефекта энергия RW возрастает на 1.6 мэВ. В Ag_{s-1} слое локализация псевдорэлеевских колебаний усиливается, а локализация высокочастотных XY- и Z-колебаний снижается на $\sim 70\,\%$. В Ag_{s-2} энергетическая область всех колебаний сужается, вследствие частотного сдвига низкочастотных XY-колебания на $+1$ мэВ и высокочастотных Z-колебаний на -0.9 мэВ, что отражает усиление внутрислоевого взаимодействия.

Значения латеральной и вертикальной релаксации поверхностных слоев Ag(001), в зависимости от размера вакансионного "кластера" и положения в нем Na, приведены в табл. 2. Анализ данных показал, что адатом Na качественно не меняет характера латеральной релаксации поверхности Ag(001) с вакансиями. Однако величина смещения ближайших соседей в Ag_s слое увеличивается на порядок, а при положении Na в центре 9-ти атомной вакансии области растяжения и сжатия теперь наблюдаются внутри Ag_{s-1} слоя. Что касается вертикальной релаксации, то адсорбция адатома Na в моновакансию практически нивелирует влияние адатома Na на вертикальную релаксацию идеальной подложки. Значение $\Delta_{12}^{\rm def}$ снижается с -6.1 до $-0.4\,\%$, а в Ag_{s-1} слое $\Delta_{23}^{\rm def}$ меняет знак. В общем случае адсорбция Na в вакансионный дефект не оказывает заметного влияния на величину и знак вертикальной релаксации поверхности Ag(001). За исключением положения Na в центре 9-ти атомной вакансии. В этом случае значения Δ_{12} увеличиваются в 2 раза. Присутствие адатома Na также не приводит к значительным измене-

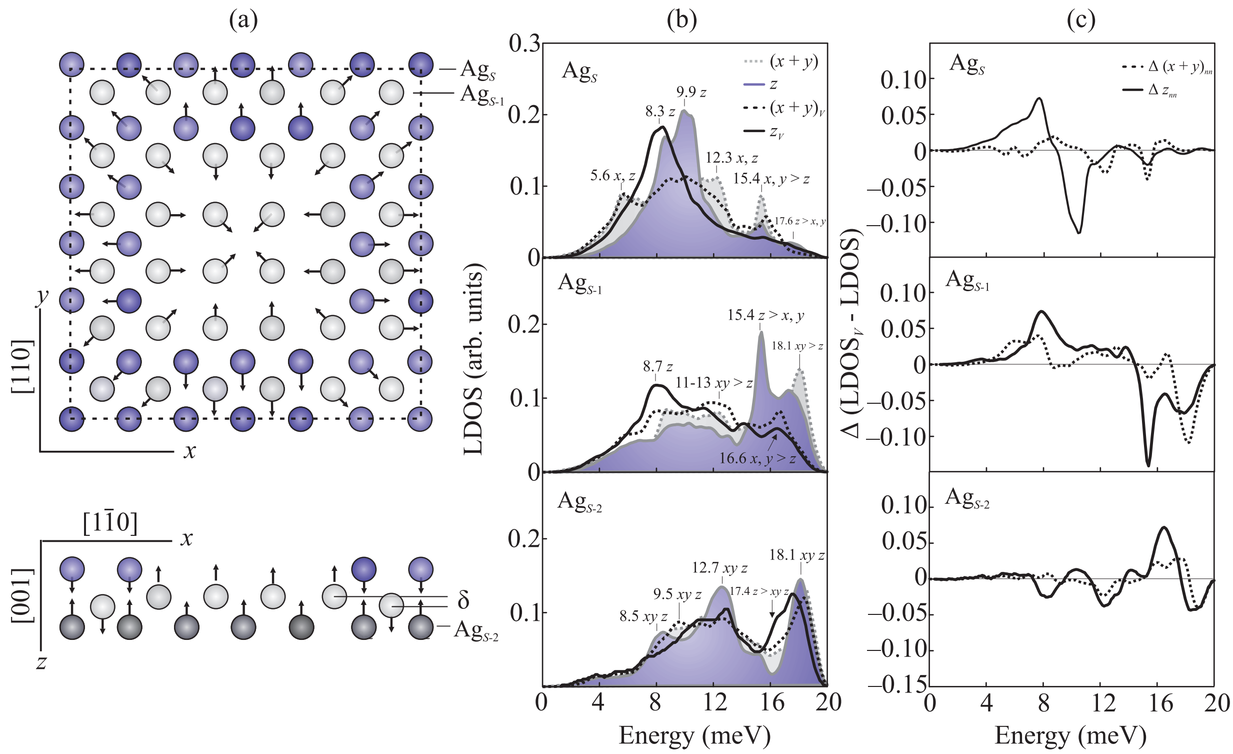

Рис. 3. (Цветной онлайн) (a)–(c) – То же, что на рис. 1, но для 9-ти атомного вакансионного “кластера”

Таблица 2. Латеральная и вертикальная релаксация в S и S-1 слоях Ag(001) в присутствии адатома Na и вакансий. Символы (1-NN) и (2-NN) обозначают первых и вторых ближайших соседей. Положительные (отрицательные) значения латеральной d_{xy} (Å) и вертикальной релаксации Δ_{ij} (%) означают увеличение (уменьшение) межатомных/межслоевых растояний. $\Delta_{ij}^{\mathrm{def}}$ – для атомов слоя вблизи дефекта и Δ_{ij} – для всех остальных атомов слоя. Na^1 и Na^2 – положение адатома в угловом и центральном положении в 9-ти атомном вакансионном “кластере” соответственно

Латеральная релаксация, d_{xy}				
Слои	Na_{1v}	Na_{4v}	Na^1_{9v}	Na^2_{9v}
$\mathrm{S}_{(1-NN)}$	+0.17	+0.12	+0.14	+0.13
$\mathrm{S}_{(2-NN)}$	−0.02	−0.03	−0.05	−0.10
$\mathrm{S\text{-}1}_{(1-NN)}$	+0.04	+0.07	+0.08	+0.08
$\mathrm{S\text{-}1}_{(2-NN)}$	+0.01	−0.04	−0.04	+0.01

Вертикальная релаксация						
	Δ_{12}	$\Delta_{12}^{\mathrm{def}}$	Δ_{23}	$\Delta_{23}^{\mathrm{def}}$	Δ_{34}	$\Delta_{34}^{\mathrm{def}}$
Na/id	−1.6	−6.1	+0.2	+1.8	−0.3	+0.4
Na/1v	−2.0	−0.4	+0.4	−1.3	−0.3	+1.1
Na/4v	−2.8	−0.9	+0.8	−2.3	−0.2	+0.6
Na^1/9v	−2.1	−0.9	+0.4	−2.7	−0.1	+0.5
Na^2/9v	−4.0	0.0	+0.7	−3.4	−0.2	+0.6

ниям величины коробления δ_z в Ag_s и Ag_{s-1} слоях подложки. Например, соответствующие δ_z для Na в 4-х атомном вакансионном “кластере” равны 0.04 Å и 0.06 Åсоответственно. Для 9-ти атомной вакансии существуют два равновесных положения адсорбции Na - угловое (на границе дефекта) с незначительным энергетическим преимуществом в $\sim$0.36 эВ и в центре вакансионного “кластера”. При этом для Na в центре 9-ти атомной вакансии максимальное коробление структуры $\delta_z = 0.12$ Å наблюдается в Ag_{s-1} слое, в то время как для Na в угловом положении, величина коробления в Ag_{s-1} слое равна $\delta_z = 0.07$ Å.

На рисунке 4 показаны LDOS для системы Ag(001) с адатомом Na, осажденным в вакансионный дефект. В случае адсорбции на идеальную поверхность в LDOS для Na (рис. 4, закрашенная область) имеются два локализованных пика, соответствующих фундаментальным модам колебаний адатома на поверхности (001) ГЦК металлов. Первый пик при 4.7 мэВ – это FT-мода (*frustrated translations mode*) несостоявшихся трансляций, которая всегда гибридизована с Z-колебаниями атомов Ag_{s-1} слоя подложки. Второй пик при 20.9 мэВ – дипольно-активная Z-мода (*strength mode*), определяемая гибридизацией вертикальных колебаний адатома и атомов подложки с Ag_s и Ag_{s-1} слоев. Аналогичные моды, локализованные на адатоме, были экспериментально обнаружены при осаждении атомов Cu на идеальную поверхность Ag(001) в работе [16].

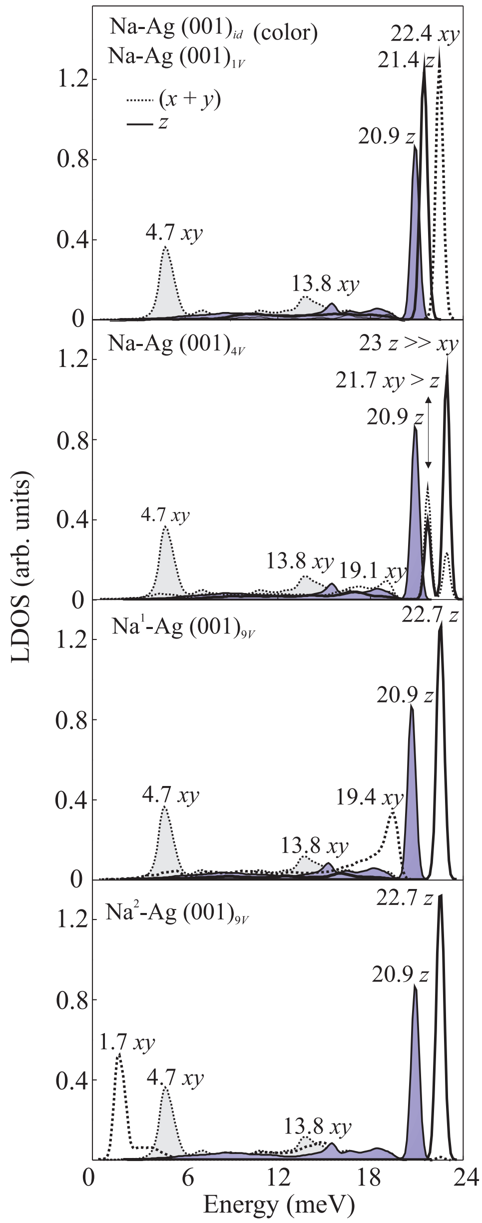

Рис. 4. (Цветной онлайн) LDOS адатома Na адсорбированного в n-вакансионный "кластер" ($n = 1, 4, 9$)на поверхности Ag (001) в сравнении с LDOS адатома Na, адсорбированного на бездефектную поверхность Ag (001) (закрашенная область). Для 9-ти атомной вакансии представлены LDOS для двух равновесных положений адсорбции: *1* – в углу вакансионного "кластера"; *2* – в его центре

При адсорбции Na в моновакансию происходит изменение характера продольных XY-колебаний адатома. Гибридизация с Z-колебаниями атомов подложки с Ag_{s-1} и Ag_{s-2} слоев приводит к их высокочастотному сдвигу и распространению выше границы объемных колебаний атомов подложки. В LDOS им соответствует локализованный пик при энергии 22.4 мэВ. При этом энергия Z-поляризованных колебаний (S-мода) Na возрастает лишь на 0.5 мэВ. Это кардинально отличается от случая осаждения адатома Cu в моновакансию. В этом случае нет выраженных индивидуальных колебаний адатома, все колебания имеют смешанный характер и влияние вакансии проявляется лишь общим повышением плотности колебаний всей системы [16]. При адсорбции в 4-х атомный вакансионный "кластер" вновь происходит изменение характера колебаний адатома Na. Из-за разницы взаимодействия с атомами Ag_s и Ag_{s-1} слоев, формирующими моноатомную ступень, FT-мода адатома расщепляется. В высокочастотной области теперь имеются два пика, которые определяются XYZ-колебаниями Na с разной степенью локализации вдоль направлений X, Y, Z. При этом колебательное состояние Na с максимальной энергией 23 мэВ имеет преимущественно Z-поляризацию. В отличие от случая с вакансией, присутствие Na не приводит к низкочастотному сдвигу RW. В Ag_{s-1} и Ag_{s-2} слоях подложки появляются вертикальные оптические колебания, которые образуют с Z-колебаниями Na дипольно-активную моду и располагаются выше области объемных колебаний при 23 мэВ. Такие выраженные индивидуальные колебания адатома Na отличаются от случая адсорбции Cu в 4-х атомной вакансии на Ag(001). Как и в случае адсорбции в моновакансию, колебания адатома Cu интегрированы в коллективные колебания подложки, что отражается увеличением их плотности [16].

При осаждении Na в угловое положение 9-ти атомной вакансии вновь происходит изменение положения FT-моды. Ее энергия понижается и в LDOS ей соответствует пик при 19.4 мэВ. При этом энергия S-моды изменяется незначительно и соответствующий ей пик обнаруживается при 22.7 мэВ. Положение Na в центре 9-ти атомной вакансии приводит к росту амплитуды продольных колебаний адатома и в LDOS им соответствует пик при энергии 1.7 мэВ. Глубоко проникая в область объемных колебаний, они инициируют в Ag_{s-1} и Ag_{s-2} слоях подложки появление нового низкочастотного Z-состояния с энергией 1.7 мэВ. При этом значение энергии S-моды остается постоянным и равно 22.7 мэВ. Аналогичное поведение продольных колебаний наблюдалось при положении адатома Cu в центре 9-ти атомной вакансии на поверхности Ag(001), только с менее выраженным низкочастотным сдвигом продольной FT-моды.

Таким образом, результаты расчетов релаксации и локальной плотности колебательных состояний идеальной поверхности Ag (001) и поверхности с точечными дефектами (вакансия/адатом) показали зависимость этих характеристик от размеров вакансионного дефекта и положения адатома Na в нем. С увеличением размера вакансии релаксация поверхности Ag (001) приобретает характер, свойственный вицинальным поверхностям ГЦК металлов, и коробление атомной структры приповерхностных слоев возрастает. Для всех рассмотренных размеров вакансионного "кластера" энергия продольных вырожденных X, Y-колебаний в Ag_s слое снижается и происходит их расщепление из-за разного характера взаимодействия ближайших к дефекту атомов с Ag_s и Ag_{s-1} слоев. Общим также является делокализация всех высокочастотных X, Y, Z-колебаний, с максимальной делокализацией $\sim 70\,\%$ в Ag_{s-1} слое и низкочастотный сдвиг рэлеевской моды.

При адсорбции Na в моновакансию или в положение вблизи границы вакансионного дефекта, происходит кратное увеличение энергии FT-моды адатома. Увеличение размера вакансии приводит к расщеплению вырожденных X, Y-колебаний из-за разного характера взаимодействия с атомами подложки вдоль направлений $[1\bar{1}0]$ и $[111]$, параллельных краю формирующейся ступени и плоскости террасы, соответственно. При этом энергия S-моды адатома слабо зависит от размеров вакансионного "кластера" и от положения адатома в нем. Анализ локальных структурных и фононных изменений, а также расчет энергии адсорбции показал, что наиболее динамически стабильной является конфигурация Na в моновакансии. Энергия адсорбции Na в моновакансию составила $E_{\mathrm{ads}} = -5.2$ эВ, в сравнении с $E_{\mathrm{ads}} = -4.4$ эВ и $E_{\mathrm{ads}} = -3.3$ эВ для 4-х и 9-ти атомной вакансии, соответственно.

Для всех размеров вакансионного "кластера" колебательные состояния Na сохраняют индивидуальный локализованный характер. Сравнение с результатами, полученными в работе [16], показало, что метод фононной визуализации поверхностных вакансий может быть наиболее эффективно использован при осаждении адатомов металла с атомными и структурными характеристиками, максимально отличными от материала подложки и позволяющими сохранять индивидуальный характер колебаний в системе.

Работа выполнена в рамках Госзадания для ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2019-0032.

Авторы выражают признательность С. В. Еремееву за конструктивные замечания и помощь при подготовке рукописи.

1. K. Oura, M. Katayama, A. V. Zotov, V. G. Lifshits, and A. A. Saranin, *Structural Defects at Surfaces*, Springer, Berlin, Heidelberg (2003), p. 195.
2. G. Li, G. R. Blake, and T. T. M. Palstra, Chem. Soc. Rev. **46**, 1693 (2017).
3. P. Ehrhart, *Atomic Defects in Metals* in *Springer Materials*, ed. by H. Ullmaier, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991), v. 25.
4. A. Jangizehi, F. Schmid, P. Besenius, K. Kremer, and S. Seiffert, Soft Matter **16**, 10809 (2020).
5. A. du Plessis, I. Yadroitsava, and I. Yadroitsev, Mater. Des. **187**, 108385 (2020).
6. K. F. McCarty, J. A. Nobel, and N. C. Bartelt, Nature **412**, 622 (2001).
7. J. Spitaler and S. K. Estreicher, Frontiers in Materials **5**, 70 (2018).
8. D. Yu. Biryukov, A. F. Zatsepin, and V. S. Kortov, Glass Physics and Chemistry **27**, 337 (2001).
9. Y. Uchida and G. Lehmpfuhl, Surf. Sci. **243**, 193 (1991).
10. E. H. H. Fouad, J. Yujie, and W. Meishan, Sci. World J. **243**, 490853 (2014).
11. Yu. N. Devyatko and S. V. Rogozhkin, Vacuum **56**, 279 (2000).
12. V. Adamyan and V. Zavalniuk, J. Phys. Condens. Matter **23**, 015402 (2010).
13. D. Walton, *Phonon-Defect Interaction*, in *Point Defects in Solids. Semiconductors and Molecular Crystals*, ed. by J. H. Crawford and L. M. Slifkin, Plenum Press, N.Y. (1975), v. 2, ch. 5, p. 393.
14. C. T. Walker and R. O. Pohl, Phys. Rev. **131**, 1433 (1963).
15. T. Altfeder, K. A. Matveev, and A. A. Voevodin, Phys. Rev. Lett. **109**, 166402 (2012).
16. K. Volgmann, H. Gawronski, Ch. Zaum, G. G. Rusina, S. D. Borisova, E. V. Chulkov, and K. Morgenstern, Nat. Commun. **5**, 5089 (2014).
17. L. Vitali, S. D. Borisova, G. G. Rusina, E. V. Chulkov, and K. Kern, Phys. Rev. B **81**, 153409 (2010).
18. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, Phys. Rev. B **33**, 7983 (1986).
19. S. D. Borisova, S. V. Eremeev, G. G. Rusina, V. S. Stepanyuk, P. Bruno, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **78**, 075428 (2008).
20. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е.В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **100**, 261 (2014) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **100**, 237 (2014)].
21. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **109**, 621 (2019) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **109**, 600 (2019)].
22. L. Verlet, Phys. Rev. **159**, 98 (1967).
23. R. A. Johnson, Phys. Rev. B **39**, 12554 (1989).
24. H. Li, J. Quimn, Y. S. Li, D. Tian, F. Jona, and P. M. Marcus, Phys. Rev. B **43**, 7305 (1991).
25. R. Heid and K.-P. Bohnen, Phys. Rep. **387**, 151 (2003).
26. Yu. Sklyadneva, G. G. Rusina, and E. V. Chulkov, Surf. Sci. **377-379**, 313 (1997).