

*На правах рукописи*

**Клавсюк Андрей Леонидович**

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ  
ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУР  
НА ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ**

Специальности: 01.04.07 – физика конденсированного состояния  
01.04.11 – физика магнитных явлений

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико–математических наук

Москва – 2008

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова и в Макс-Планк институте физики микроструктур (г. Галле, Германия).

**Научные руководители:** доктор физико–математических наук,  
профессор Салецкий Александр Михайлович  
доктор физико–математических наук,  
профессор Степанюк Валерий Станиславович

**Официальные оппоненты:** доктор физико–математических наук,  
профессор Бушуев Владимир Алексеевич  
кандидат физико–математических наук,  
Спичкин Юрий Иванович

**Ведущая организация:** Оренбургский государственный университет

Защита состоится «1» октября 2008г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.002.01 при Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр.2, МГУ, физический факультет, ауд. \_\_\_\_\_

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан « \_\_ » августа 2008 года.

Ученый секретарь

Диссертационного совета Д 501.002.01

в МГУ имени М. В. Ломоносова

кандидат физико–математических наук

Т.В. Лаптинская

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Для успешного прогресса в современных технологиях необходимо создание принципиально новых устройств базирующихся на наноструктурах. В связи с этим малые атомные кластеры, наноконтакты и другие наноструктуры на поверхности металлов вызывают значительный научный интерес. Специфичность свойств вещества в нанометровом масштабе и связанные с этим новые физические явления обусловлены тем, что характерные размеры элементов структуры нанобъектов соответствуют средним размерам атомов в обычных материалах. Управляя размерами и формой наноструктур, таким материалам можно придавать совершенно новые функциональные характеристики. В связи с этим актуальным становится исследование структурных, электронных и магнитных свойств наноструктур на поверхности металлов, установление закономерностей размерных эффектов для наноконтактов и изучение влияния атомных релаксаций на свойства наносистем.

**Цель и задачи работы.** Цель данной работы – теоретическое исследование электронных, магнитных и структурных свойств малых магнитных кластеров и металлических наноконтактов на поверхности твердого тела. В частности, были поставлены следующие задачи:

1. Разработка метода численного моделирования, позволяющая находить атомную структуру кластеров и наноконтактов.
2. Исследование влияния атомной релаксации на электронные и магнитные свойства наноструктур.

3. Установление электронных и магнитных свойств структур погруженных кластеров кобальта в поверхность меди.
4. Исследование деформаций и напряжений в металлических наноконтактах.
5. Изучение изменений электронных состояний наноконтакта при увеличении его длины.
6. Исследование магнетизма для ряда  $3d$  и  $4d$  наносистем на поверхности меди и определение энергетически стабильных состояний для магнитных наноконтактов.

**Научная новизна.** В настоящей работе впервые:

1. На основе теории функционала электронной плотности, метода функций Грина и молекулярной динамики развита методика исследования электронных и магнитных характеристик наноструктур.
2. Впервые показано, что погружение кластера кобальта в медную поверхность уменьшает почти в два раза магнитную энергию анизотропии и делает распределение орбитальных моментов более однородным.
3. Выявлена осцилляция среднего гидростатического напряжения при растяжке наноконтактов, обусловленная структурными изменениями. Рассчитанная сила разрыва медного наноконтакта (1.4 nN) показала, что связь в контакте более прочная, чем в кристалле.

4. Показан механизм изменения электронных свойств наноконтактов посредством увеличения размеров, приводящих к увеличению незаполненных электронных состояний в медных контактах.
5. Расчеты энергии для антиферромагнитного, ферромагнитного и парамагнитного состояния показали возможность магнетизма в  $4d$  наноконтактах.

**Практическая ценность.** Представленное в работе описание электронных и магнитных свойств кластеров и наноконтактов на поверхности меди может быть использовано при анализе экспериментов и при создании новых магнитных материалов.

**Положения, выносимые на защиту.**

1. Метод исследования атомных релаксаций и физических свойств наноструктур на поверхности металлов.
2. Электронные и магнитные свойства кластеров кобальта на поверхности  $\text{Cu}(100)$  и влияние атомных релаксаций на данные свойства.
3. Взаимосвязь между электронными и механическими свойствами медных наноконтактов.
4. Магнитные свойства наноконтактов  $3d$  и  $4d$  металлов.

**Апробация работы.** Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

1. Computational Magnetoelectronics 2 Annual Meeting and Midterm Review (Oleron Island, France, 2002);

2. 22nd European Conference on Surface Science (Prague, Czech Republic, 2002);
3. Spring Meeting of German Physical Society (Dresden, Germany, 2003);
4. Fundamental Aspects of Surface Science (Kerkrade, Netherlands, 2003);
5. Spring Meeting of German Physical Society (Regensburg, Germany, 2004);
6. KKR-Workshop on New Developments, Applications and Collaborations (Munich, Germany, 2004);
7. Joint European Laboratory Meeting (Halle, Germany, 2004);
8. International Symposium on Theory of Atomic and Molecular Clusters (Toulouse, France, 2004);
9. Spring Meeting of German Physical Society (Berlin, Germany, 2005);
10. Symposium on Spin-Polarized Processes at Surfaces (Halle, Germany, 2005);
11. 23rd European Conference on Surface Science (Berlin, Germany, 2005);
12. 13th International Congress on Thin Films / 8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (Stockholm, Sweden, 2005);
13. European Conference on Surface Science (Paris, France, 2006);

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 9 научных статей и тезисы к 6 докладам на научных конференциях (всего 15 печатных работ).

**Личный вклад автора.** Все основные результаты работы получены лично диссертантом. Вклад диссертанта в диссертационную работу является определяющим.

**Структура и содержание работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 113 страницах, включает 55 рисунков и 8 таблиц. Общее число ссылок составляет 103. Каждую главу предваряет вступительная часть, представляющая краткое содержание и основные задачи текущей главы. В конце диссертации сформулированы основные результаты, достигнутые в ней.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, указана ее научная новизна и практическая значимость, приведено краткое содержание работы по главам.

**Первая глава** посвящена обзору литературы по теме диссертации. В ней проанализированы экспериментальные и теоретические работы, в которых впервые были представлены исследования электронных и магнитных свойств кластеров на поверхности металлов, проведен анализ экспериментальных работ, в которых, впервые при использовании сканирующего туннельного микроскопа были получены наноконтакты, также представлен ряд теоретических работ по  $3d$  и  $4d$  магнетизму в наноконтактах.

Анализ экспериментальных и теоретических данных позволил сформулировать в завершающей части обзора постановку задачи: она состоит в исследовании электронных, магнитных и структурных свойств наносистем на поверхности металлов и исследования влияния эффекта атомных релаксаций на физические свойства наноструктур. Для решения этих задач необходимо разработать метод, позволяющий находить атомную структуру наносистем и исследовать их свойства.

Во **второй главе** представлено описание метода, который основан на связи двух методов: метода Корринга–Кон–Ростокера (ККР) функций Грина и метода молекулярной динамики (МД). Предложенный метод, базируется на основных принципах квантовой механики и позволяет изучать структурные, электронные и магнитные свойства наносистем.

В **третьей главе** рассматриваются магнитные свойства погруженных кластеров Со в поверхность Cu(001) и влияние мезоскопических релаксаций на магнитные свойства.

Ранее полагалось, что атомная релаксация на поверхности раздела Со/Cu(111) определяется макроскопической величиной  $m_0 = (a_{Cu} - a_{Co})/a_{Cu} \approx 2\%$ , где  $a_{Co}$  и  $a_{Cu}$  – параметры решетки Со и Cu соответственно. Однако, было показано [1,2], что мезоскопические кластеры имеют собственный присущий им параметр решетки отличный от значения в объемном образце. Это приводит к значительным деформациям кластера и подложки под ними. Вследствие вышесказанного расстояния между атомами кластеров Со на Cu(001) будут отличны от расстояний между атомами Со в объеме(кристалле).

Было показано, что в малых кластерах атомная релаксация больше



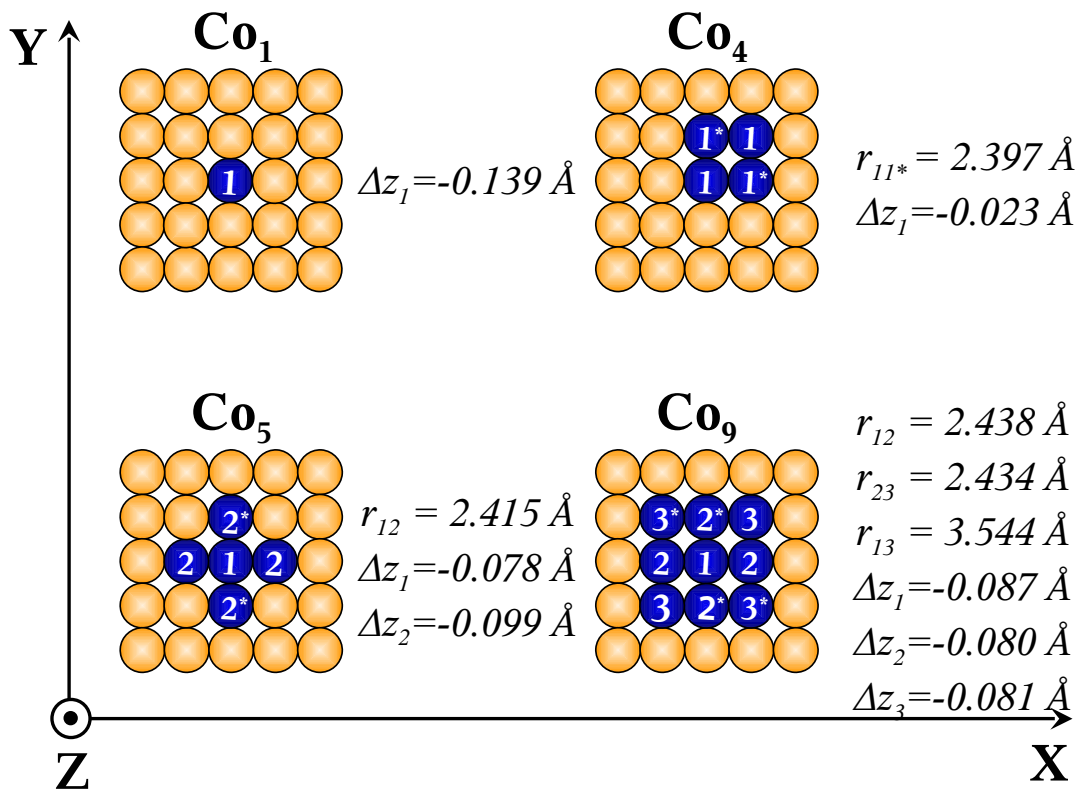


Рис. 1: Длины связей  $r_{ij}$  погруженных кластеров и вертикальные смещение  $\Delta z$  относительно идеальной поверхности. Длина связи в идеальной ГЦК структуре равна  $2.556 \text{ \AA}$ . Звездочкой (\*) отмечены атомы  $n=1-3$ , которые становятся неэквивалентными в случае намагничивания вдоль X направления.

за счет крайних атомов. Эти атомы смещаются в направлении центра кластера и занимают положения с более короткой длиной связи, чем в идеальной ГЦК структуре. Эффект атомной релаксации для малых кластеров кобальта на поверхности меди составляет 8 %, для погруженных кластеров 6 %. С увеличением размера кластеров влияние крайних атомов становится меньше и средняя длина связи увеличивается и эффект атомной релаксации 2-3 %.

Было установлено, что кластер приводит к деформации поверхно-

сти и вызывает неоднородные смещения атомов в системе. На рис. 1 представлены атомные связи и вертикальные смещения (по отношению к идеальной поверхности) малых кластеров погруженных в поверхность Cu(001). Как видно из рис. 1 атомы в кластере взаимодействуют по разному, все зависит от того, где атом находится, какое у него окружение и.т.д. Как было показано, равновесная геометрия погруженных кластеров существенно отличается от идеальной геометрии.

**Таблица 1:** Средние значение ЭМА  $\Delta E$  для погруженных кластеров. Оси намагничивания  $Z$ ,  $X$  и  $X+Y$  показаны на рис. 1. В скобках указаны значения ЭМА для идеальной геометрии.

Кластер	$\Delta E(X, Z)$ (meV/атом)	$\Delta E(X + Y, Z)$ (meV/атом)
Co <sub>1</sub>	-1.82 (-2.58)	-1.75 (-2.42)
Co <sub>4</sub>	-0.30 (-0.60)	-0.32 (-0.65)
Co <sub>5</sub>	-1.22 (-1.47)	-1.20 (-1.51)
Co <sub>9</sub>	-0.78 (-0.91)	-0.68 (-0.86)

В третьей главе рассматривается влияние атомной релаксации на магнитные и электронные свойства атомов в кластере для двух конфигураций: идеальная геометрия и срелаксированная.

В таблице 1 представлены расчеты энергии магнитной анизотропии (ЭМА) для атома Co и для кластеров Co<sub>4</sub>, Co<sub>5</sub> и Co<sub>9</sub> в поверхности Cu(001) для равновесной и идеальной геометрии(значения в скобках). Физический смысл ЭМА заключается в том, что ЭМА определяет ориентацию намагничивания кластера относительно поверхности. В нашем случае это разность энергий между двумя направлениями:

**Таблица 2:** Орбитальные магнитные моменты  $L^m$  для Z, X, и X+Y направлений намагниченности, и спиновые магнитные моменты  $M$  атомов Co атомов в кластерах (см. рис. 1). В скобках указаны значения для идеальной геометрии, все величины указаны в  $\mu_B$ .

Кластер	Атом	$L_Z^m(\mu_B)$	$L_X^m(\mu_B)$	$L_{X+Y}^m(\mu_B)$	$M(\mu_B)$
Co <sub>1</sub>	1	0.51 (0.67)	0.61 (0.80)	0.60 (0.79)	1.26 (1.54)
	1*	0.15 (0.19)	0.20 (0.27)	0.24 (0.31)	1.68 (1.70)
Co <sub>5</sub>	1	0.09 (0.13)	0.15 (0.20)	0.15 (0.20)	1.78 (1.82)
	2	0.22 (0.30)	0.40 (0.46)	0.35 (0.43)	1.51 (1.63)
	2*	0.22 (0.30)	0.27 (0.38)	0.35 (0.43)	1.51 (1.63)
Co <sub>9</sub>	1	0.10 (0.13)	0.19 (0.24)	0.19 (0.25)	1.76 (1.80)
	2	0.13 (0.16)	0.19 (0.24)	0.18 (0.22)	1.70 (1.73)
	2*	0.13 (0.16)	0.17 (0.21)	0.18 (0.22)	1.70 (1.73)
	3	0.18 (0.21)	0.28 (0.32)	0.25 (0.29)	1.65 (1.66)
	3*	0.18 (0.21)	0.28 (0.32)	0.26 (0.30)	1.65 (1.66)

$Z$ -перпендикулярном к поверхности и  $X$ ,  $X + Y$ -параллельном к поверхности. Оси  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  показаны на рис. 1. Отрицательное значение ЭМА означает, что намагниченность кластера направлена параллельно к поверхности. Результаты, показанные в таблице 1, ясно демонстрируют, что атомные релаксации в погруженных кластерах значительно уменьшают ЭМА. Наибольший эффект виден для  $\text{Co}$  и  $\text{Co}_4$ , для которых эффект релаксации наиболее большой (см. рис. 1). В таблице 2 представлены орбитальные  $L^m$  и спиновые  $M$  магнитные моменты атомов  $\text{Co}$  в кластерах. Как видно из таблицы 2 магнитные моменты атомов всех кластеров направлены вдоль осей  $X$  и  $X + Y$ . Здесь представлена только электронная часть энергии анизотропии, потому что вклад диполь-дипольного взаимодействий очень мал для малых кластеров, например для кластера с девятью атомами это всего лишь  $0.03 \text{ meV/атом}$ .

Анализ спиновых и орбитальных моментов разных кластеров (таблица 2) показал, что одиночный атом кобальта имеет наибольший орбитальный момент в обоих случаях (идеальном и равновесном). При увеличении атомов в кластере спиновый магнитный момент у атомов увеличивается, так как магнитные моменты в погруженных кластерах стабилизируются и увеличиваются из-за взаимодействия между атомами кобальта. Орбитальные же моменты погруженных кластеров значительно подавляются взаимодействиями между атомами. Например, орбитальные моменты центральных атомов и крайних атомов в кластере  $\text{Co}_9$  в 3–5 раз меньше чем в случае одиночного атома кобальта.

Сравнение магнитных свойств 9-ти атомного кластера кобальта на

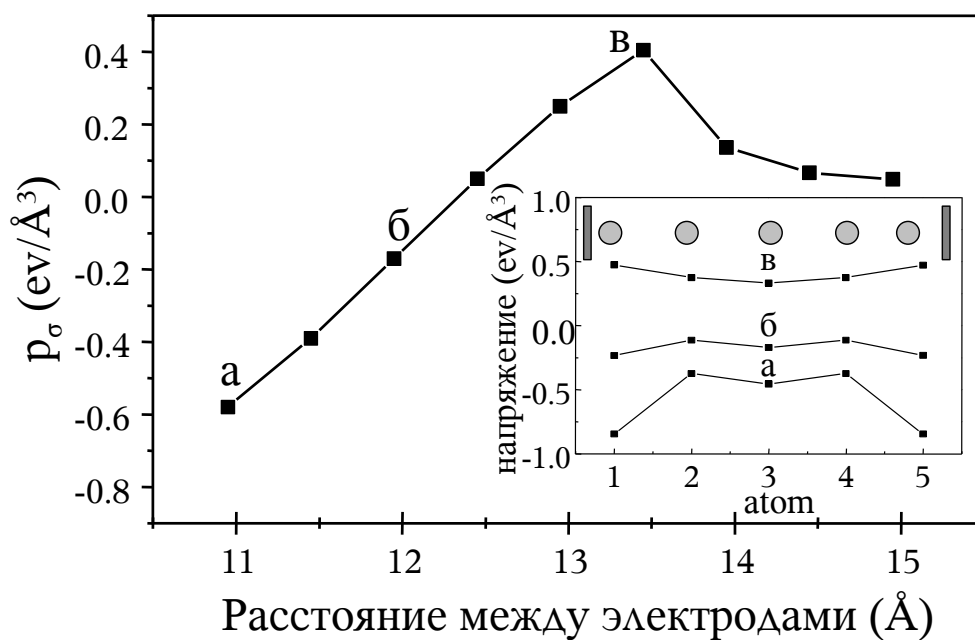
поверхности и в поверхности показало, что погружение кластера в медную поверхность уменьшает ЭМА и делает распределение орбитальных моментов более однородным. ЭМА крайних атомов (атомы 3\*, 3) уменьшается почти в два раза при погружении. Стоит так же отметить, что орбитальные моменты для перпендикулярного намагничивания менее чувствительны к вышеупомянутым изменениям.

**Четвертая глава** посвящена результатам исследования структуры, квантовых эффектов и магнетизма в наноконтактах.

Анализ длин связей контактов различных металлов (Cu, Co, Fe, Rh, Pd) указал на две характерные особенности структурных свойств наноконтактов: расстояния между атомами в контакте отлично от расстояний между атомами в идеальном кристалле; распределение длин связей атомных контактов неоднородно. Расчеты выполненные в диапазоне температур 0–100 К показали большую стабильность контактов.

В данной главе были исследованы распределения напряжений в наноконтактах меди. Изменения среднего гидростатического напряжения (усредненного по атомам) в медном контакте при растяжке показано на рис. 2. Расчет был произведен при  $T=0$  К для 5-ти атомного контакта, расположенного между двумя поверхностями (электродами).

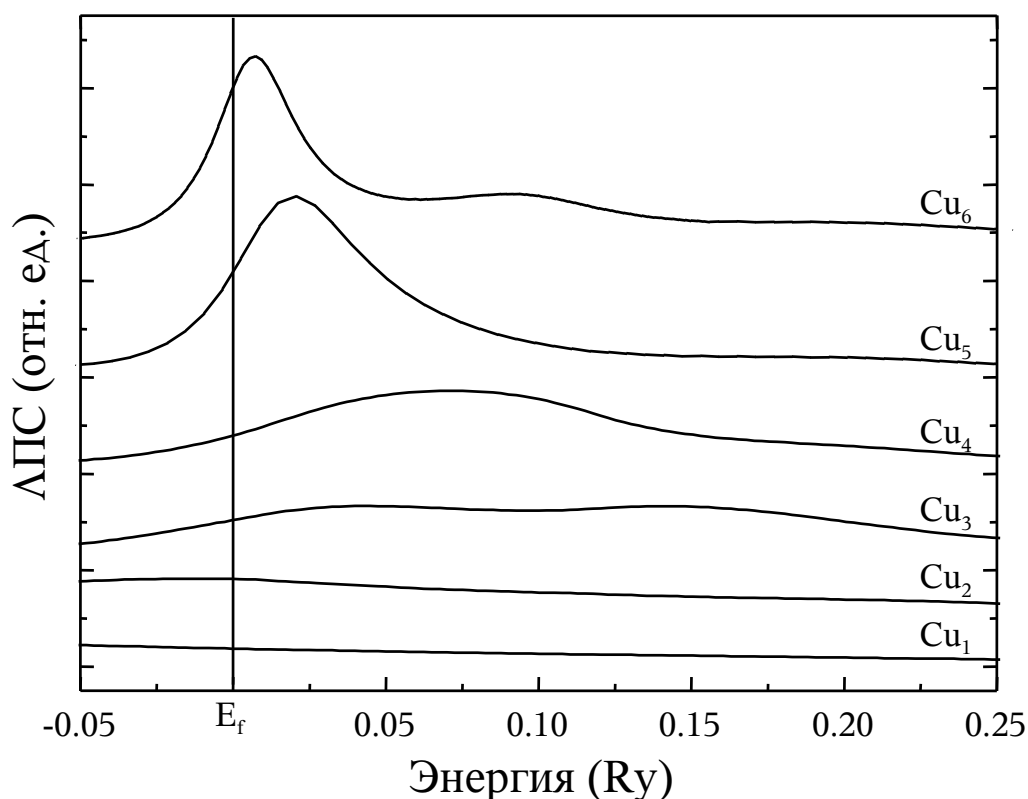
При расстоянии 11 Å между электродами (точка а на рис. 2) контакт находится в сжатом состоянии и как следствие среднее гидростатическое напряжение отрицательно. Далее при растяжке наноконтакта напряжение в цепи увеличивается линейно и при дальнейшем увеличении расстояний между электродами (точка б на рис. 2) среднее гидростатическое напряжение меняет знак. Таким образом, нанокontakt переходит



**Рис. 2:** Среднее гидростатическое напряжение (усредненное по атомам)  $p_\sigma$  в медном контакте; гидростатическое напряжение на отдельных атомах в контакте для точек а, б и в (вставка).

из сжатого состояния в растянутое. В определенной точке гидростатическое напряжение резко уменьшается (точка в на рис. 2), и контакт разрывается. Физический смысл гидростатического напряжения следующий: когда напряжение отрицательное, контакт находится в сжатом состоянии, если же напряжение положительное, то контакт растянут. В точке, где среднее гидростатическое напряжение равно нулю силы, действующие на атомы цепочки очень малы и данная система энергетически более стабильна, чем все остальные. Сила разрыва цепочки, т.е. минимальная сила необходимая для разрыва связи между двумя атомами в цепочке равна 1.4 nN. Для сравнения сила разрыва в кристалле (объеме) 0.8 nN. Данный факт свидетельствует о том что связь в контакте более

прочная чем в кристалле.



**Рис. 3:** Квантовый размерный эффект: развитие квази одномерной электронной структуры в контактах меди, состоящих из 1–6 атомов; представлены только с состояния на центральном атоме.

Так же стоит отметить, что локальное напряжение на атомах цепочки меди неоднородно (см. вставку на рис. 2). Причина этого заключена в том, что распределение расстояний между атомами так же неоднородно. И только перед разрывом контакта длина связей становится равномерным и как следствие напряжение в цепочке однородно.

Одним из важных вопросов является изменение электронных свойств наноконтактов при растяжке. Для установления связи между электронными свойствами и структурой, была рассчитана локальная плотность

электронных состояний для атомов меди в контакте.

В отличие от идеализированного случая локальная плотность состояний наноконтактов более размыта по энергии (ширина резонансных пиков больше), так как контакт обладает конечной длиной, и атомы взаимодействуют с электродами. Развитие одномерных состояний и их смещения к более низким энергиям при увеличении числа атомов в контакте хорошо видно на рис. 3. Движение пиков описывается как  $L^{-2}$ , где  $L$  – расстояние между электродами. Подобные изменения плотности состояний прекрасно показывают взаимосвязь между электронными и механическими свойствами наноконтактов и указывают на тот факт, что, меняя длину контактов, мы можем управлять его электронными свойствами.

В этой же главе представлены результаты исследования  $4d$  магнетизма в металлических контактах. Установлено, что кластер палладия на медной поверхности является немагнитным (см. рис. 4). Немагнитными будут и толстые контакты, однако как показали расчеты, при дальнейшем растяжении образуется атомный контакт, атомы которого обладают магнитным моментом (рис. 4). При этом из-за большой протяженности  $4d$  волновых функций влияние атомных релаксаций на магнетизм  $4d$  систем будет намного больше, чем для  $3d$  систем.

Для трехатомных контактов  $\text{Pd}_3$  и  $\text{Rh}_3$  были найдены ферромагнитные состояния. В случае  $\text{Pd}_3$ , магнитные моменты центральных и крайних атомов очень малы,  $0.3 \mu_B$  и  $0.1 \mu_B$  соответственно. Магнитные моменты крайних атомов уменьшены из-за взаимодействия с электродами. Анализ распределения заряда в  $\text{Pd}_3$  показывает, что существование магнитных моментов происходит вследствие  $sd$  гибридизации, которое рез-



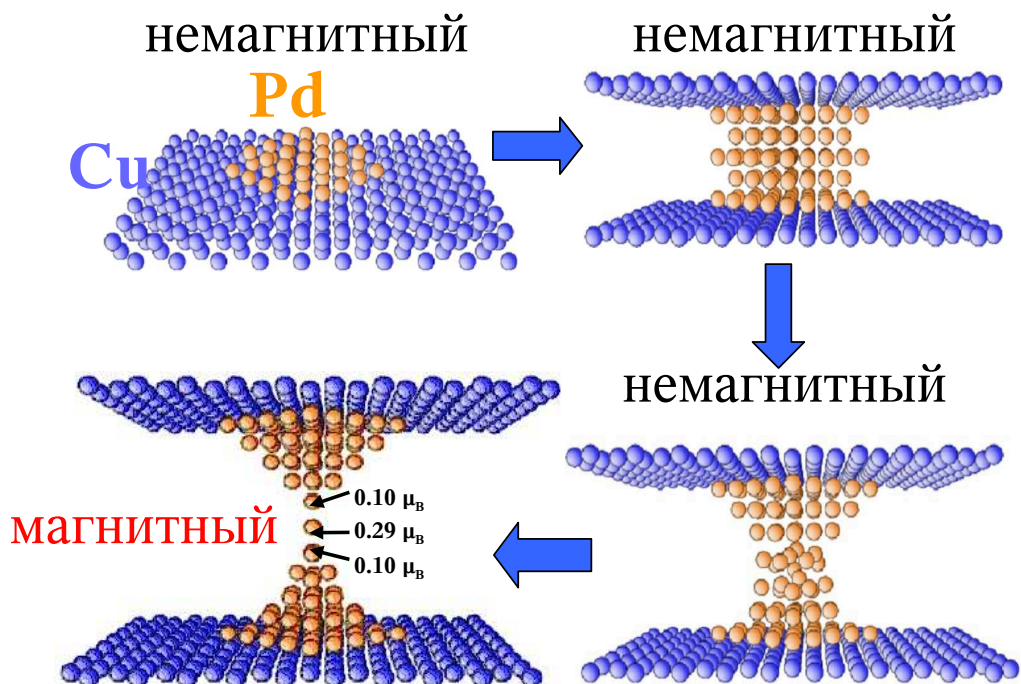


Рис. 4: Магнетизм в наноконтактах из палладия.

ко уменьшает количество  $d$  электронов вокруг атома палладия. Наши расчеты полной энергии для  $\text{Pd}_3$  показали, что разница между ферромагнитным и парамагнитным состоянием всего лишь  $6 \text{ meV}$  и немагнитное состояние является более стабильным. Принимая во внимание тот факт, что наноконтакты являются метастабильными системами [3], даже слабые структурные изменения, увеличение температуры или другие изменения в системе могут привести контакт из немагнитного состояния в магнитное состояние и наоборот. Магнитный момент на центральном атоме  $\text{Pd}_3$  наноконтакта равен  $1.47 \mu_B$ , а магнитный момент атомов в близости от электродов уменьшается до  $0.38 \mu_B$ , что в четыре раза меньше по сравнению с моментом на центральном атоме. Атомные релаксации и взаимодействие с электродами, приводят к неоднородному распределению магнитных моментов в контакте. Энергия ферромагнитного контакта на  $0.2 \text{ eV}$  меньше чем энергия парамагнитного контакта.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан метод, базирующийся на основных принципах квантовой механики, который позволяет исследовать структурные электронные и магнитные свойства кластеров, нанопроводов и наноконтактов.
2. Для кластеров кобальта на поверхности и погруженных в поверхность  $\text{Cu}(001)$  были рассчитаны магнитные характеристики: орбитальный магнитный момент, энергия магнитной анизотропии и спиновый магнитный момент. Установлено, что погружение кластера кобальта в медную поверхность уменьшает почти в два раза магнитную энергию анизотропии и делает распределение орбитальных моментов более однородным.
3. Установлено, что атомные релаксации в погруженных кластерах кобальта значительно уменьшают значения энергии магнитной анизотропии, орбитальные и спиновые магнитные моменты.
4. Выявлены изменения структурных свойств медных наноконтактов при их удлинении и установлено что связь в контактах сильнее чем в кристалле. Найдена взаимосвязь между структурными и электронными свойствами металлических контактов.
5. Получена корреляция между структурными, электронными и магнитными свойствами наноконтактов  $3d$  и  $4d$  металлов. На примере контактов  $\text{Pd}$  и  $\text{Rh}$  показана возможность магнетизма в  $4d$  наноконтактах, обусловленное  $sd$  гибридизацией.

## СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ПО ТЕМЕ ДИСЕРТАЦІЇ

1. V.S. Stepanyuk, P. Bruno, A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, W. Hergert, A.M. Saletsky, I. Mertig, Structure and quantum effects in atomic-sized contacts, *Phys. Rev. B* **69**, 033302 (2004).
2. S. Pick, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, L. Niebergall, W. Hergert, J. Kirschner, P. Bruno, Magnetism and structure on the atomic scale: Small cobalt clusters in Cu(001), *Phys. Rev. B* **70**, 224419 (2004).
3. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, W. Hergert, A.M. Saletsky, P. Bruno, I. Mertig, Magnetism and structure of atomic-size nanocontacts, *Phys. Rev. B* **70**, 195420 (2004).
4. A.L. Klavsyuk, V.S. Stepanyuk, W. Hergert, A.M. Saletsky, P. Bruno, I. Mertig, Structure and electronic states in Cu nanocontacts, *Surface Science*, **566-568**, 944-948 (2004).
5. H.L. Meyerheim, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, E. Soyka, J. Kirschner, Structure and atomic interactions at the Co/Pd(001) interface: Surface x-ray diffraction and atomic-scale simulations, *Phys. Rev. B* **72**, 113403 (2005).
6. V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, L. Niebergall, P. Bruno, End electronic states in Cu chains on Cu(111): Ab initio calculations, *Phys. Rev. B* **72**, 153407 (2005).
7. V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, L. Niebergall, A.M. Saletsky, W. Hergert, P. Bruno, Ab Initio approach for atomic relaxation in

- supported magnetic clusters, *Phase Transitions*, **78**, 61 (2005).
8. R.Z. Huang, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, W. Hergert, P. Bruno, J. Kirschner, Atomic relaxations and magnetic states in a single-atom tunneling junction, *Phys. Rev. B* **73**, 153404 (2006).
  9. M. Czerner, A. Bagrets, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, I. Mertig, Parity oscillation and Relaxation in Monatomic Copper Wires, *Phys. Rev. B*, **74**, 115108 (2006).
  10. V.S. Stepanyuk, P. Bruno, A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, W. Hergert, I. Mertig, Atomic bridges: structure, electronic and magnetic properties, *Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society, Dresden, 2003*, p. 347.
  11. A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, V.S. Stepanyuk, P. Bruno, W. Hergert, I. Mertig, Structure and magnetic properties of nanocontacts, *Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society, Dresden, 2003*, p. 302.
  12. I. Mertig, A. Bagrets, N. Papanikolaou, M. Czerner, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, W. Hergert, Stability and transport of nanocontacts: Ab initio description, *Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society, Dresden, 2003*, p. 244.
  13. A.L. Klavsyuk, A.N. Baranov, V.S. Stepanyuk, W. Hergert, P. Bruno, I. Mertig, Quantum effects in atom-sized contacts, *Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society, Regensburg, 2004*, p. 317.

14. M. Czerner, A. Bagrets, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavsyuk, I. Mertig, Transport in nanowires: An ab initio description, Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society, Berlin, 2005, p. 24(MA).
15. A.L. Klavsyuk, V.S. Stepanyuk, L. Niebergall, A.M. Saletsky, W. Hergert, P. Bruno, Ab initio approach for atomic relaxation in supported magnetic clusters, Proceedings of the Spring Meeting of German Physical Society, Berlin, 2005, p. 60(O).

### ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. V.S. Stepanyuk, D.V. Tsvilin, D. Sander, W. Hergert, J. Kirschner, Mesoscopic scenario of strain-relief at metal interfaces, *Thin Solid Films* **428**, 1-5 (2003).
2. V.S. Stepanyuk, D.I. Bazhanov, A.N. Baranov, W. Hergert, P.H. Dederichs, J. Kirschner, Strain relief and island shape evolution in heteroepitaxial metal growth, *Phys. Rev. B* **62**, 15398 (2000).
3. N. Agrait, A.L. Yeyati, J.M. van Ruitenbeek, Quantum properties of atomic-sized conductors, *Phys. Rep.* **377**, 81 (2003).