

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ НА ВИЦИНАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ АЛЮМИНИЯ, СЕРЕБРА И МЕДИ

© Г.Г.Русина, А.В.Берч, И.Ю.Скляднева, С.В.Еремеев,
А.Г.Липницкий, Е.В.Чулков

Институт физики прочности и материаловедения Российской академии наук,
634048 Томск, Россия
(Поступила в Редакцию 30 марта 1995 г.)
В окончательной редакции 26 сентября 1995 г.)

В рамках метода погруженного атома проведены расчеты колебательных состояний (фононов) на вицинальных поверхностях (211), (311), (221), (331), а также на поверхности (110) алюминия, серебра и меди. Вычисления выполнены как для релаксированных, так и для идеальных поверхностей. На всех рассматриваемых поверхностях обнаружены моды колебаний, локализованные на ступенях (так называемые степ-моды). Имеются также состояния, локализованные на атомах террасы. Показано, что с увеличением числа атомов на террасе растет число поверхностных состояний. Найдено, что релаксация поверхности приводит к сдвигу частот поверхностных состояний, изменению их числа и степени локализации в слоях. В частности, показано, что учет релаксации может приводить к появлению или исчезновению отдельных степ-мод. Сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными для поверхности Al(221) свидетельствует о хорошем согласии теории и эксперимента в описании колебательных состояний на этой поверхности. На примере рассмотренных поверхностей показано, что характер релаксации вицинальных поверхностей определяется количеством атомов на террасе.

Поверхности с высокими индексами Миллера на микроскопическом уровне можно рассматривать как совокупность плоских фрагментов (террас) поверхностей с низкими индексами (100), (111), бесконечно протяженных в одном направлении и разделенных моноатомными ступенями [1]. Эти поверхности играют важную роль в каталитических процессах, поскольку атомные узлы на ступенях являются предпочтительными для адсорбции различных атомов и молекул и в зависимости от условий могут либо ускорять, либо замедлять реакции, протекающие на поверхности. Атомные узлы на ступенях важны для зарождения двумерных адсорбированных структур и роста кристаллов. Для понимания переноса энергии в таких процессах важно знать колебательную структуру поверхностей. Кроме обычных поверхностных состояний, локализованных на атомах террасы, на вицинальных поверхностях могут появиться колебательные моды, локализованные в основном на атомах ступени и распространяющиеся вдоль ступеней [2,3]. В случае если ступень содержит кинки, могут появиться колебательные моды, локализованные на атоме кинка. Следовательно, структура колебательных мод на поверхностях с высокими индексами носит более сложный характер, чем в случае гладких поверхностей с низкими индексами.

До настоящего времени наиболее активно исследовались колебательные состояния на поверхностях с низкими индексами [4–34]. Экспериментальное изучение фононных мод проводилось в основном с использованием методов высокоразрешающей спектроскопии потерь энергии электронов (EELS) [4,26–31] и неупругого рассеяния атомов гелия (HAS) [5,24,32,33]. Теоретические исследования выполнялись в рамках различных методов силовых постоянных [7,8,34], полуфеноменологических схем типа метода погруженного атома (МПА) [17–23] и подходов из первых принципов [9–16,30]. В методах силовых постоянных не удается установить связь между изменением силовых постоянных и изменением электронной плотности, вызванными образованием поверхности. Этот эффект учитывается в самосогласованных методах расчета из первых принципов [9–16,30]. Однако вследствие сложности они проводятся только для поверхностей с низкими индексами. Промежуточное место между методами силовых постоянных и подходами из первых принципов занимают полуфеноменологические методы расчета типа МПА [17–19,21–23] и методов теории эффективной среды [20]. В этих методах имеется вклад в полную энергию, определяемый электронной плотностью и описывающий многочастичные межатомные взаимодействия. Основной недостаток МПА связан с отсутствием процедуры самосогласованного построения электронной плотности, которая берется в виде суперпозиции атомных плотностей. Достоинства МПА определяются его простотой и тем, что МПА правильно воспроизводит основные атомные характеристики объемного металла [21,35,36]. Расчеты колебательных состояний на поверхностях с низкими индексами [17–23] показали, что МПА позволяет получить фоновую структуру таких поверхностей в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчетов из первых принципов. Но, по-видимому, наиболее эффективное МПА может применяться для расчета колебательных состояний поверхностей с высокими индексами. С одной стороны, это связано с тем, что для вицинальных поверхностей релаксация оказывает значительно большее влияние на кристаллическую структуру, чем в случае поверхностей с низкими индексами [21,37]. Поэтому необходимо учитывать влияние релаксации на колебательную структуру поверхности. В то же время параметризованные модели силовых постоянных не позволяют рассчитать многослойную релаксацию априорным образом [34]. С другой стороны, использование методов расчета из первых принципов для таких поверхностей требует неприемлемо больших затрат машинного времени. МПА позволяет преодолеть эти трудности и дает возможность проводить расчеты как многослойной релаксации, так и фононных состояний вицинальных поверхностей за приемлемое компьютерное время. Арман и Масри [37] и Блэк и Бошп [38] использовали метод силовых постоянных для расчета колебательных состояний на нерелаксированных поверхностях никеля с высокими индексами. Нипш [2,3] использовал для классификации фононных состояний, локализованных на ступенях нерелаксированных поверхностей, модель силовых постоянных, включающих взаимодействия только ближайших соседей. Тиан и Блэк [39] вычисляли локальную плотность фононных состояний на релаксированных вицинальных

поверхностях меди типа (11n), используя метод непрерывных дробей и межатомные потенциалы, полученные в рамках МПА.

В настоящей работе представлены результаты расчета фоновых дисперсионных кривых для релаксированных и нерелаксированных вицинальных поверхностей (211), (221), (311) и (331) алюминия и серебра, для поверхностей (211) и (311) меди, а также для поверхности (110) алюминия, серебра и меди. Эту поверхность можно рассматривать как простейшую вицинальную поверхность с террасами типа (111) и ступенями с ориентацией (11 $\bar{1}$) [1]. Результаты расчета для Al(110) и Al(211) были представлены ранее в [21], где анализ проводился без микроскопического разделения этих поверхностей на террасы и ступени.

1. Метод расчета

В МПА потенциальная энергия записывается в виде [35,36]

$$E = \frac{1}{2} \sum_{ij} \varphi(r_{ij}) + \sum_i F_i \left[\sum_{j(\neq i)} \rho_j^a(r_{ij}) \right].$$

В этом выражении первое слагаемое представляет собой сумму парных потенциалов взаимодействия атомов $\varphi(r_{ij})$, где r_{ij} — расстояние между ядрами i -го и j -го атомов. Второе слагаемое описывает многочастичные эффекты. Погружающая функция F_i определяется электронной плотностью в узле r_i . Последняя находится в виде суперпозиции электронных плотностей всех остальных атомов, расположенных в узлах r_j . В отличие от [35,36] в расчете функции погружения мы использовали зарядовую плотность свободного атома, вычисленную в приближении локальной плотности [40,41]. Параметры метода подгонялись под экспериментальные данные алюминия, серебра и меди по энергии сублэмации, равновесному объему, трем модулям упругости и энергии образования вакансии. Равновесное положение поверхностных слоев (релаксированная геометрия) находилось методом молекулярной динамики при нулевой температуре. Фоновые поверхностные состояния вычислялись в модели тонких пленок.

2. Структура вицинальных поверхностей

Кристаллическая структура поверхностей (221) и (311) и соответствующие двумерные зоны Бриллюэна изображены на рис. 1–3. На рис. 1,а,б показаны фрагменты этих поверхностей. Как видно из рис. 1,а, терраса поверхности (221) вдоль направления, перпендикулярного ступени, содержит четыре атома, включая атом, расположенный на ступени, и атом, лежащий в углу, образованном ступенью и террасой. На поверхности (331) терраса содержит три атома, тогда как на террасе поверхности (110) находятся два атома. Из рис. 1,б видно, что терраса с ориентацией (111) на поверхности (311) содержит два атома. На террасе другой поверхности этого типа, (211), располагаются три атома. На рис. 2,а,б представлен вид сверху на элементарные ячейки поверхностей (221) и (311). Элементарные ячейки включают один атом от каждой атомной плоскости. Числа около атомов нумеруют плоскости, которые составляют наименьший период трансляции в идеальной

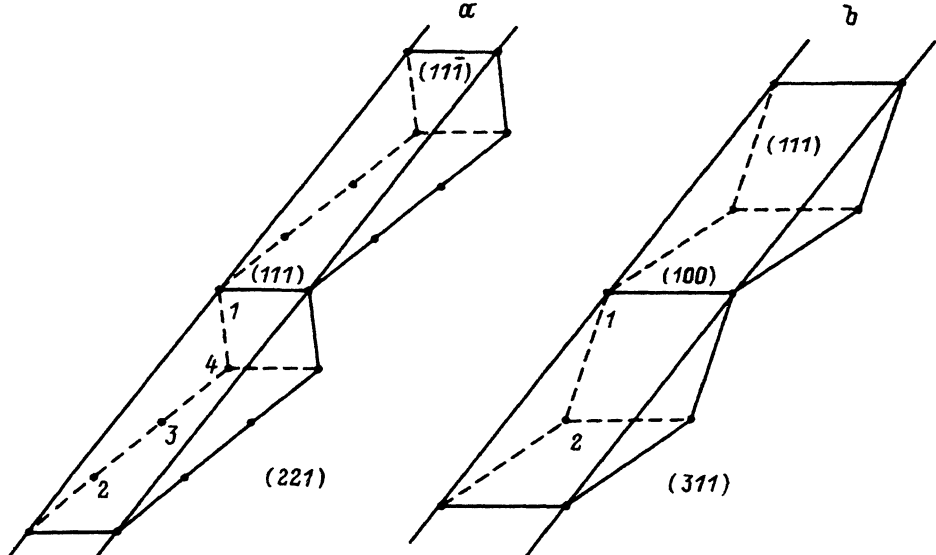


Рис. 1. Фрагмент поверхностей (221) (а) и (311) (б), включающий террасу с ориентацией (111) и ступень с нормалью $(1\bar{1}1)$ и (100) соответственно.

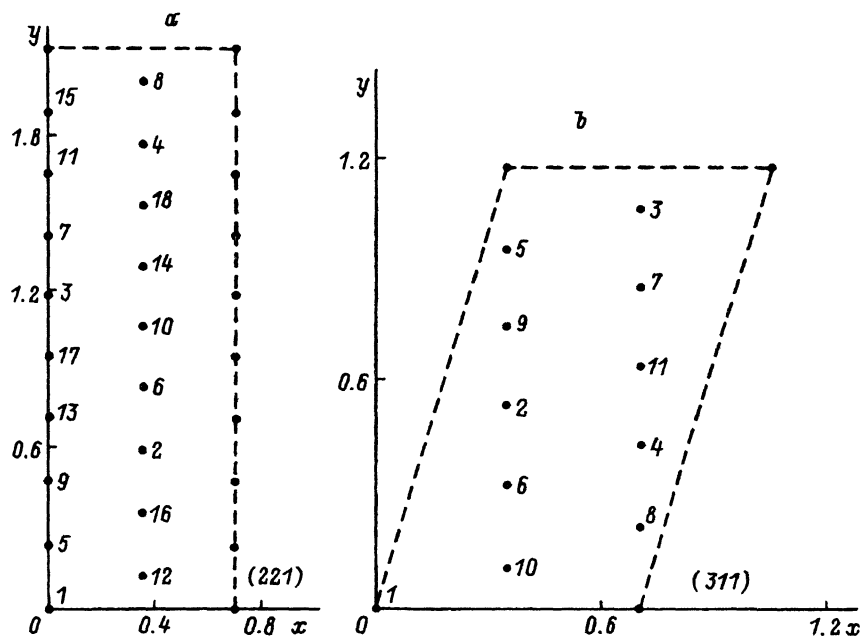


Рис. 2. Вид сверху на элементарную ячейку поверхностей (221) (а) и (311) (б). Цифры около атомов обозначают номер атомного слоя, которому принадлежит данный атом. Количество приведенных слоев составляет период трансляции вдоль направлений (221) и (311) соответственно в объеме металла. Размеры двумерной элементарной ячейки вдоль осей координат приводятся в единицах параметра решетки.

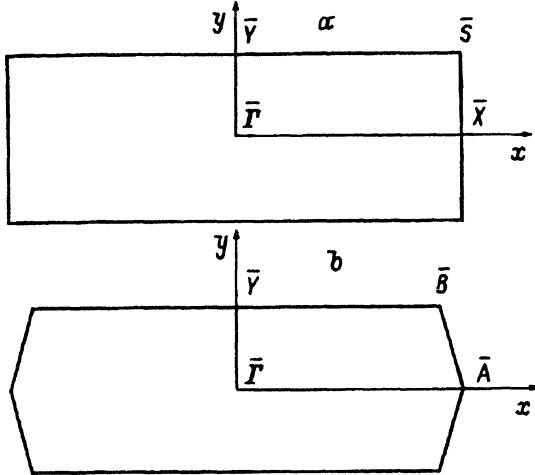


Рис. 3. Зона Бриллюэна и ее неприводимая часть для поверхностей (221) (a) и (331) (b).

ГПК-решетке вдоль направлений (221) и (311). Рис. 3,а представляет зону Бриллюэна и ее неприводимую часть, соответствующую поверхностям (110), (211) и (221). Зона Бриллюэна поверхностей (311) и (331) показана на рис. 3,б. Отметим, что для всех рассматриваемых поверхностей направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$ и $\bar{\Gamma}\bar{A}$ совпадают с направлением вдоль ступени.

3. Результаты расчета. Обсуждение

1) Многослойная релаксация. Результаты расчета многослойной релаксации рассматриваемых поверхностей представлены в табл. 1. Для сравнения здесь же показаны имеющиеся экспериментальные данные и результаты ряда псевдопотенциальных расчетов из первых принципов [10,43,49]. Из табл. 1 видно, что изменение межслоевых расстояний (в процентах) для вицинальных поверхностей значительно больше, чем для плотноупакованных (111) и (100), для которых $d_{12} \approx -1\%$ (см., например, [21,53] и ссылки там), причем релаксация является многослойной и немонотонной. Строго осциллирующая релаксация с поджатием первого межслоевого расстояния наблюдается для поверхностей (110) и (311), террасы которых содержат два атома, включая атом, расположенный на ступени. Однако уже для поверхностей (211), (331), террасы которых содержат три атома, строго осциллирующий характер релаксации нарушается. В частности, уменьшаются два первых межслоевых расстояния. В случае поверхности (221) релаксация приводит к уменьшению первых трех межслоевых расстояний, образуемых первыми четырьмя слоями, атомы которых располагаются на террасах этой поверхности. Приведенные результаты показывают, что многослойная релаксация вицинальных поверхностей характеризуется поджатием первых межслоевых расстояний, количество которых определяется числом атомов на террасе соответствующей поверхности. Этот вывод подтверждается данными, полученными в [21,53]

Многослойная релаксация вицинальных поверхностей

Поверхность	Метод	d_{12}	d_{23}	d_{34}	d_{45}	d_{56}
Al(110)	Наст. расчет	-7.4	0.8	-0.6	0.3	-0.1
	Эксперимент	-8.4 ± 0.8	4.9 ± 1.0	-1.6 ± 1.1	0.2 ± 1.1	-
	LEED [42]					
	Расчет [43]	-6.8 ± 0.5	3.5 ± 0.5	-2.0 ± 0.5	1.6 ± 0.5	-
	Расчет [10]	-5.4	0.8	-2.6	-	-
Ag(110)	Наст. расчет	-5.9	0.5	-0.3	0.2	-0.1
	Эксперимент	-5.7	2.2	-3.5	-	-
	LEED [44]					
	Эксперимент	-7.8 ± 2.5	4.3 ± 2.5	-3.5 ± 0.5	-	-
	Эксперимент	-9.5 ± 2.0	6.0 ± 2.5	-3.5 ± 1.0	-	-
Cu(110)	Наст. расчет	-4.5	0.2	-0.5	-	-
	Эксперимент	-5.3	3.3	-	-	-
	HEIS [47]					
	Эксперимент	-7.9	2.4	-	-	-
Al(331)	Наст. расчет	-10.8	-2.6	1.5	-1.6	0.3
	Эксперимент	-11.7 ± 2.3	-4.1 ± 3.1	10.3 ± 2.7	-4.8 ± 4.1	-2.4 ± 5.3
	LEED [48]					
Ag(331)	Расчет [49]	-11.3	-6.3	10.1	-4.4	-1.8
	Наст. расчет	-9.7	-0.9	0.1	-0.7	0.1
Al(221)	Наст. расчет	-11.4	-5.1	-2.5	3.6	-3.9
Ag(221)	Наст. расчет	-10.3	-4.8	0.2	1.4	-3.8
Al(311)	Наст. расчет	-11.6	3.5	-3.5	2.2	-1.3
	Эксперимент	-13	9	-	-	-
	LEED [50]					
Ag(311)	Наст. расчет	-9.8	3.4	-3.1	2.1	-1.3
Cu(311)	Наст. расчет	-8.9	3.8	-3.6	2.0	-1.3
	Эксперимент	-7.3	3.7	-0.0	-	-
	LEED [51]					
Al(211)	Эксперимент	-11.9	1.8	-	-	-
	LEED [52]					
Al(211)	Наст. расчет	-12.5	-6.9	7.3	-5.5	-1.2
Ag(211)	Наст. расчет	-10.5	-6.1	6.9	-5.0	-1.1
Cu(211)	Наст. расчет	-10.3	-5.1	7.3	-5.6	-1.1

Примечание. Изменение расстояния d_{ij} между i -м и j -м поверхностными слоями приводится в процентах по отношению к межслоевому расстоянию. Знак - соответствует уменьшению межслоевого расстояния, число без знака соответствует его увеличению. LEED — дифракция электронов низких энергий, RBS — обратное резерфордское рассеяние, HEIS — рассеяние ионов высоких энергий.

для большого количества вицинальных поверхностей алюминия и платины.

Из сравнения наших результатов с известными экспериментальными и теоретическими данными можно заключить, что в целом МПА описывает релаксацию в согласии с экспериментом и расчетами из первых принципов. Особенно хорошее согласие наблюдается для изменения первого межслоевого расстояния. В то же время следует отметить, что при удалении от поверхности изменения межслоевого расстояния, найденные по МПА, уменьшаются быстрее, чем полученные в эксперименте и в расчетах из первых принципов.

2) Фононы на поверхностях (311) и (211). Рассчитанные дисперсионные кривые показаны на рис. 4 для релаксированной 45-слойной пленки Al(311). Из этого рисунка видно, что вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{A}$ наблюдается несколько поверхностных состояний. Нижнее из них в точке \bar{A} представляет собой характерное степ-состояние типа E_1 , локализованное на атомах ступени, колеблющихся в перпендикулярном к ступени направлении преимущественно в плоскости поверхности (311), но с примесью смещений в направлении нормали к этой поверхности. Около 44% состояния (величины квадрата амплитуды) приходится на атомы ступени, и около 42% — на атомы второго поверхностного слоя. При смещении волнового вектора от точки \bar{A} к $\bar{\Gamma}$ эта мода попадает в область объемных состояний, превращаясь в поверхностный резонанс с поперечными смещениями атомов в плоскости поверхности. Второе снизу состояние в точке \bar{A} является степ-модой типа E_2 , локализованной на 62% на атомах ступени, со смещениями этих атомов вдоль нормали к поверхности (311) и с небольшой примесью поперечных смещений в плоскости поверхности. Третье состояние в точке \bar{A} локализовано преимущественно в верхних четырех атомных

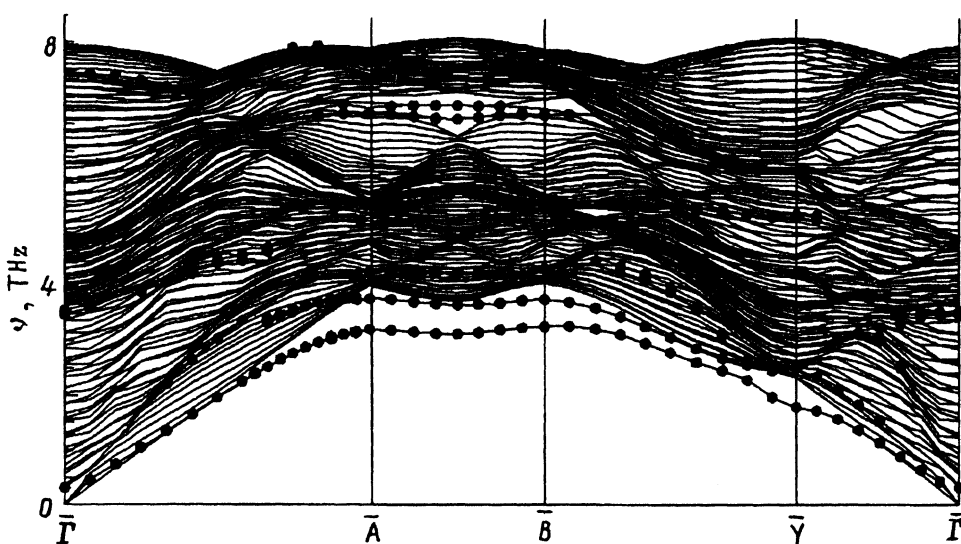


Рис. 4. Рассчитанные фононные дисперсионные кривые вдоль линий симметрии для релаксированной 45-слойной пленки Al(311).

Поверхностные состояния показаны черными кружками. Состояния, изображенные более частым чередованием черных кружков, представляют собой степ-моды.

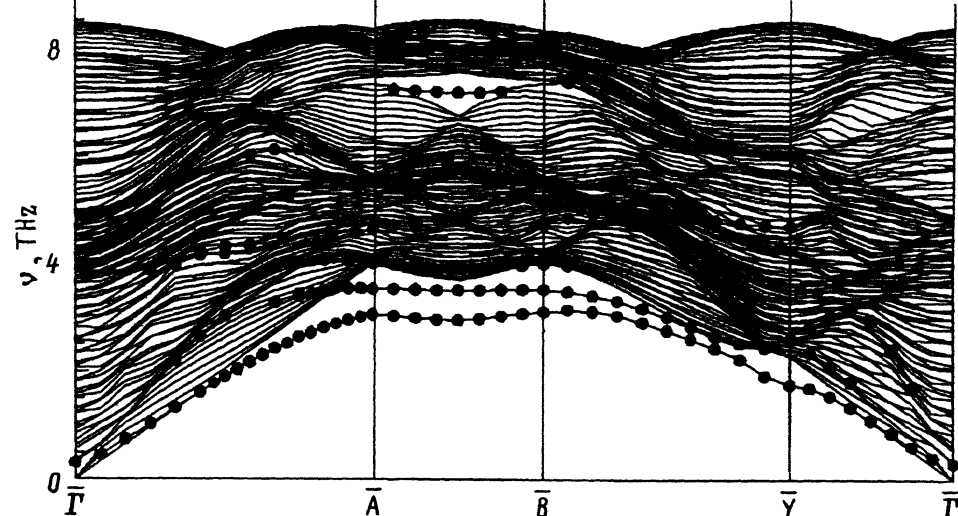


Рис. 5. Расчитанные фононные дисперсионные кривые для нерелаксированной 45-слойной пленки Al(311)

слоях (на верхний слой приходится 34% состояния) и характеризуется как продольными, так и поперечными смещениями атомов. В направлении $\overline{A\Gamma}$ это состояние быстро превращается в объемное. Вблизи запрещенной щели в точке \overline{A} наблюдается двукратно вырожденное поверхностное состояние, локализованное в основном на втором слое, с поперечно-продольными смещениями атомов первых двух слоев. При изменении волнового вектора вдоль $\overline{A\Gamma}$ вырождение снимается, и это состояние быстро превращается в объемное. Кроме перечисленных состояний в направлении $\overline{\Gamma A}$ существует еще несколько. Мода продольных колебаний наблюдается в точке $\overline{\Gamma}$. Около 55% этого состояния локализовано в двух верхних слоях. В верхней части спектра вдоль $\overline{\Gamma A}$ имеются два коротких резонанса, локализованных на втором и третьем атомных слоях. Поверхностные состояния вдоль направления \overline{AB} являются продолжением соответствующих состояний в точке \overline{A} . В направлении $\overline{B\Upsilon}$ исчезают верхние состояния, но появляются два новых резонанса. В направлении $\overline{\Gamma\Upsilon}$, перпендикулярном ступени, колебания атомов нижнего состояния в окрестности точки $\overline{\Upsilon}$ локализованы на ступени и происходят вдоль ступени. Второе снизу состояние является резонансом с преимущественно поперечными вертикальными смещениями атомов. Колебания атомов третьего состояния происходят в сагиттальной плоскости.

На рис. 5 представлены расчитанные дисперсионные кривые для нерелаксированной 45-слойной пленки Al(311). Из сравнения рис. 4 и 5 следует, что при релаксации сохраняются обе степ-моды E_1 и E_2 . Учет релаксации приводит к появлению продольного поверхностного состояния в точке $\overline{\Gamma}$, дополнительных поверхностных состояний в высокочастотной области вдоль направлений $\overline{\Gamma A}$ и \overline{AB} , а также состояния вдоль $\overline{B\Upsilon}$. При этом исчезает несколько резонансных состояний.

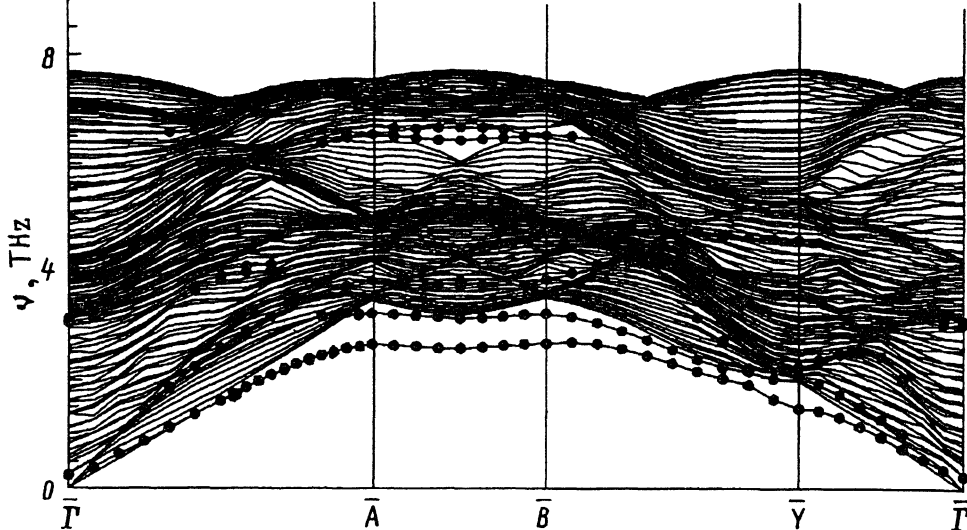


Рис. 6. То же, что и на рис. 4, для 45-слойной пленки Cu(311).

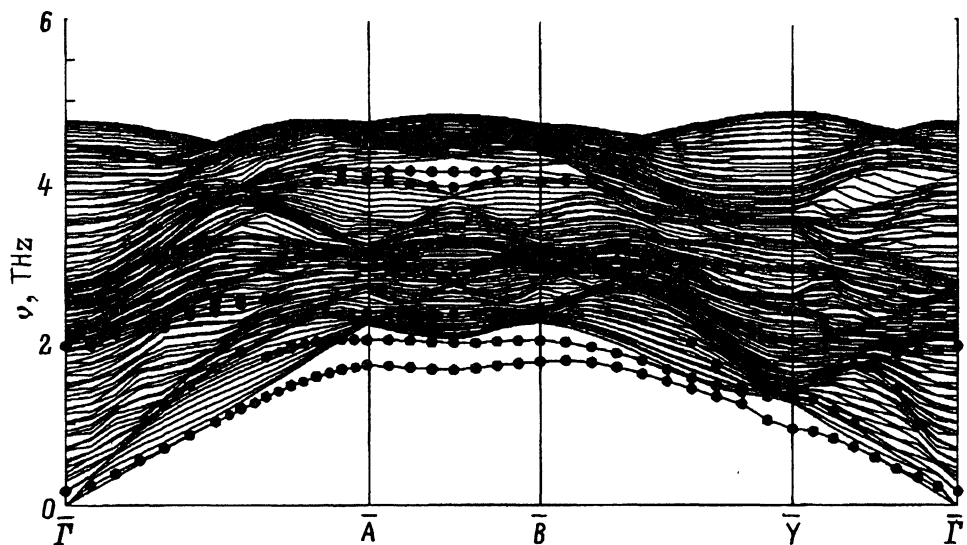


Рис. 7. То же, что и на рис. 4, для 45-слойной пленки Ag(311).

Вычисленные дисперсионные кривые для 45-слойных релаксированных пленок Cu(311) и Ag(311) представлены на рис. 6 и 7 соответственно. Из сравнения рис. 4, 6 и 7 следует, что фоновые структуры поверхности (311) алюминия, меди и серебра в целом подобны. Имеются небольшие различия, касающиеся некоторых резонансных мод. В табл. 2 приведены значения частот полученных поверхностных мод для Al, Cu и Ag в высокосимметричных точках зоны Бриллюэна.

Резюмируя полученные результаты, можно отметить, что фоновая структура поверхности (311) ГПК-металлов Al, Cu, Ag характеризуется двумя степ-модами E_1 и E_2 , продольной модой колебаний в точке $\bar{\Gamma}$

Частоты колебательных состояний (в ТГц),
найденных на поверхности (311) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{A} , \bar{B} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота			
		Al(311), релакс.	Al(311), нерелакс.	Cu(311), релакс.	Ag(311), релакс.
$\bar{\Gamma}$	X_1, X_2	3.5	—	3.1	1.9
\bar{A}	$E_1 \Rightarrow Y_1; Y_2, Z_2$	3.2	3.1	2.7	1.7
	$E_2 \Rightarrow Z_1 > Y_1$	3.8	3.5	3.2	2.0
	$X_1, Y_1; Y_2, Z_2$	4.3	4.0	3.8	2.4
	$X_1; X_2, Z_2$	—	4.7	—	—
	X_2, Y_2	7.2	—	6.6	4.0
	X_2	—	—	—	4.1
\bar{B}	$Y_1; Y_2, Z_2$	3.3	3.1	2.7	1.8
	$Z_1 > Y_1$	3.8	3.5	3.2	2.0
	$X_1, Y_1; Y_2, Z_2; Y_3, Z_3$	4.3	4.0	3.9	2.4
	X_2, Y_2	7.2	—	6.5	4.0
\bar{Y}	X_1, X_2	1.8	1.8	1.5	0.9
	$Y_1, Z_1; Z_2$	2.5	2.6	2.1	1.4
	$Z_1; Z_3$	—	—	2.2	1.5
	$Y_1, Z_1; Z_2; Y_3, Z_3$	5.3	4.7	4.6	2.9

Примечание. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями $[011]$, $[233]$ и $[311]$ соответственно. Индексы 1-3 обозначают номера поверхностных слоев, смещения атомов которых в основном определяют данное состояние.

и двумя состояниями в запрещенной щели вдоль направления \bar{AB} . В отличие от авторов [3] мы не обнаружили смешанной степ-моды ME_3 продольных колебаний, найденной Ниппом для вицинальных поверхностей с террасами типа (111) и ступенями с ориентацией (100).

На рис. 8 показаны рассчитанные дисперсионные кривые для релаксированной 48-слойной пленки Al(211). Как видно из этого рисунка, в направлении $\bar{X}\bar{X}$ имеется ряд поверхностных мод колебаний. Нижняя мода в $\bar{X}\bar{X}$ описывает поперечные колебания с преимущественными смещениями атомов ступени в плоскости поверхности (211). Около 45% состояния локализуется на атомах ступени, и $\sim 40\%$ приходится на атомы третьего слоя. Это типичная мода E_1 . С уменьшением волнового вектора состояние E_1 попадает в область объемных состояний и становится резонансом. Второе снизу состояние локализуется в основном на атомах террасы, что соответствует второму атомному слою. Это состояние отсутствует на поверхности (311). Третье состояние в точке $\bar{X}\bar{X}$ представляет собой степ-моду E_2 и характеризуется преимущественно поперечными вертикальными смещениями атомов ступени. Четвертое состояние локализовано до 50% на первом и третьем слоях и характеризуется поперечными горизонтально-вертикальными

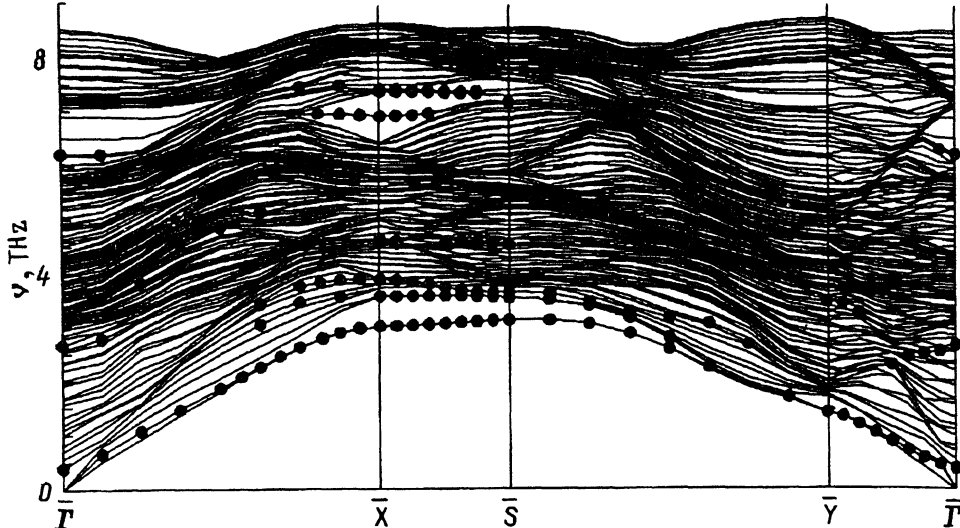


Рис. 8. То же, что и на рис. 4, для 48-слойной пленки Al(211).

смещениями атомов. Пятое состояние в точке \bar{X} в значительной степени локализовано на ступени и определяется продольными смещениями атомов. В области высоких частот в запрещенной щели наблюдаются состояния, локализованные в основном на первых четырех слоях. Нижнюю из щелевых мод можно рассматривать как степ-моду ME_3 с продольными смещениями атомов ступени и атомов, расположенных в углу. В окрестности точки $\bar{\Gamma}$ имеется продольная мода (с частотой 2.7 THz в $\bar{\Gamma}$). Ее можно рассматривать как степ-моду продольных колебаний, локализованную на первом и третьем атомных слоях. В направлении $\bar{X}\bar{S}$ все найденные состояния являются продолжением соответствующих состояний в точке \bar{X} . В направлении $\bar{S}\bar{Y}$ имеются только состояния E_1 и E_2 , а также мода, соответствующая колебаниям атомов, расположенных на террасе. В направлении $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ нижняя мода описывает поперечные смещения как атомов ступени, так и атомов террасы, происходящие вдоль ступени. Второе состояние в точке \bar{Y} определяется смещением атомов двух верхних слоев в сагиттальной плоскости. Расчет дисперсионных кривых для нерелаксированной поверхности Al(211) показал, что на такой поверхности состояние ME_3 вообще отсутствует, хотя основные черты спектра сохраняются при переходе от релаксированной поверхности к идеальной.

Расчет 48-слойных пленок Cu(211) и Ag(211) показал, что влияние элемента на колебательную структуру поверхности (211) сводится в основном к изменению масштаба шкалы частот. Некоторые различия наблюдаются в точках высокой симметрии. В табл. 3 приведены значения частот в этих точках для всех трех элементов. На примере алюминия можно видеть, что влияние релаксации поверхности сводится в основном к трем факторам. Во-первых, изменяется число поверхностных состояний. Во-вторых, изменяется энергия состояний на величину $\sim 0.1-0.3$ THz. При этом, как правило, частота состояния на релаксированной поверхности больше соответствующей частоты на идеальной

Частоты колебательных состояний (в THz),
найденных на поверхности (211) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{S} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота			
		Al(211), релакс.	Al(211), нерелакс.	Cu(211), релакс.	Ag(211), релакс.
$\bar{\Gamma}$	$X_1; X_3$	2.7	2.4	2.3	1.4
	$Y_1, Z_1; Y_2, Z_2; Z_3; Z_4$	6.2	-	5.7	-
\bar{X}	$E_1 \Rightarrow Y_1 > Z_1; Y_3, Z_3$	3.0	2.9	2.5	1.6
	$Z_2 > Y_2$	3.6	3.4	2.9	1.9
	$E_2 \Rightarrow Z_1 > Y_1$	3.9	3.6	3.3	2.1
	$Y_1, Z_1; Y_3, Z_3$	4.5	4.3	4.0	-
	$X_1; Y_2$	4.6	-	4.2	2.6
	$E_3 \Rightarrow X_1; X_3$	6.9	-	6.3	3.8
	X_2	7.4	7.0	-	4.1
	X_3	7.5	7.3	6.8	4.2
\bar{S}	$Y_1; Y_3, Z_3$	3.1	3.0	2.6	1.7
	$Y_1, Z_1; X_2, Y_2, Z_2$	3.5	3.4	3.0	1.9
	$Y_1, Z_1; Y_2, Z_2$	3.6	3.5	3.1	2.0
	$Z_1; Y_3, Z_3$	4.5	-	-	-
	X_3	7.2	-	6.6	-
\bar{Y}	$X_1; X_2$	1.4	1.4	1.2	0.7
	Z_3	-	-	1.6	-
	$Y_1, Z_1; Y_2, Z_2$	3.4	3.3	2.8	1.8
	$Y_1; Y_3, Z_3$	-	-	3.6	-

Примечание. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями $[0\bar{1}1]$, $[\bar{1}11]$ и $[211]$ соответственно.

поверхности. В-третьих, изменяется степень локализации состояния в слоях. Более сильная локализация поверхностных состояний наблюдается в случае нерелаксированной поверхности.

Интересно отметить, что в отличие от поверхностей с низкими индексами на вицинальных поверхностях обнаруживаются колебательные состояния в точке $\bar{\Gamma}$. Такие состояния впервые были найдены на поверхности (110) для ряда ГЦК-металлов $[^{21-23,54}]$; по-видимому, они являются характерными для поверхностей, которые могут быть представлены в виде комбинации террас и ступеней.

Суммируя полученные результаты, можно заключить, что в дополнение к состояниям, найденным на поверхности (311), на поверхности (211) появляется состояние, локализованное на атомах террасы, частота которого в точке \bar{X} лежит между частотами степ-мод E_1 и E_2 . Кроме того, в точке \bar{X} наблюдается смешанная мода ME_3 продольных колебаний, а в точке $\bar{\Gamma}$ появляется еще одно резонансное состояние в области высоких частот.

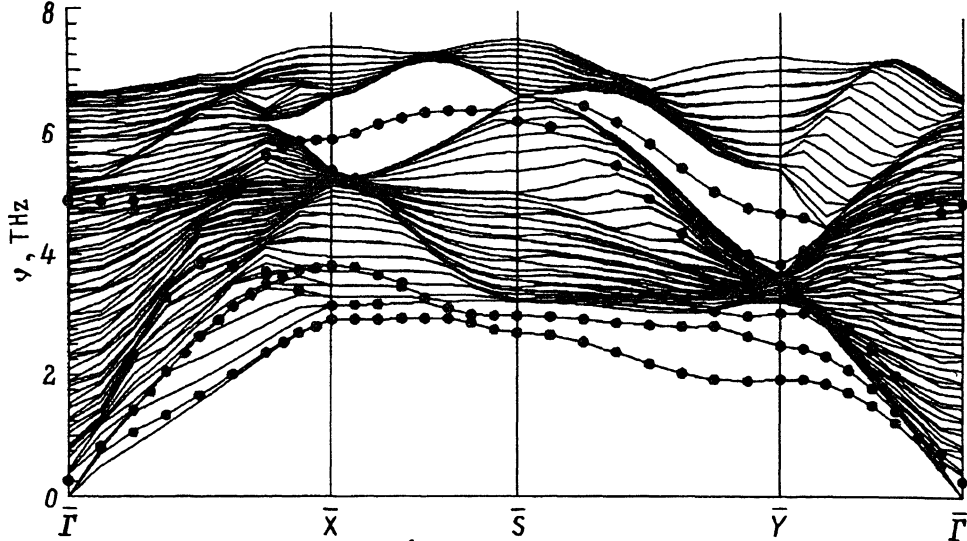


Рис. 9. То же, что и на рис. 4, для 30-слойной пленки Cu(110).

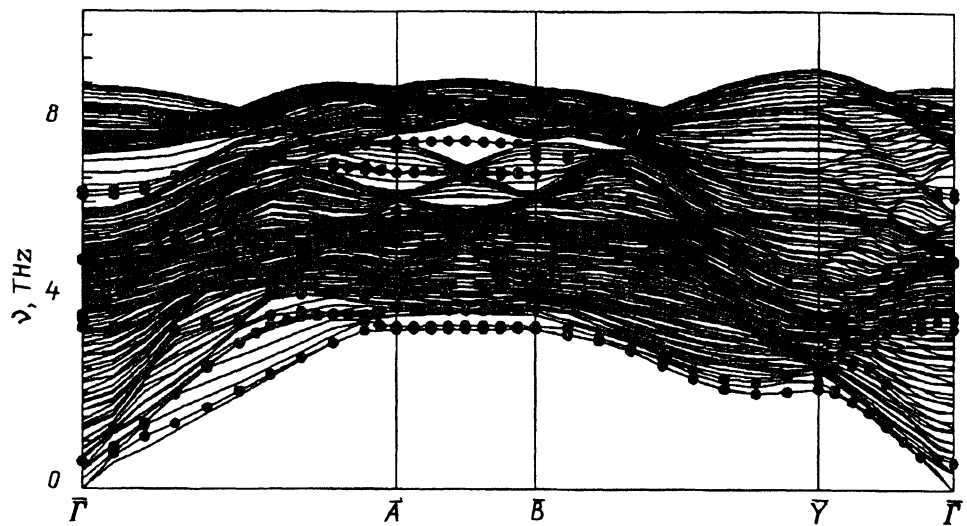


Рис. 10. То же, что и на рис. 4, для 57-слойной пленки Al(331).

3) Фононы на поверхностях (110), (331) и (221). На рис. 9 представлены рассчитанные дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Cu(110). Из этого рисунка видно, что в направлении $\bar{\Gamma}\bar{X}$ наблюдается пять поверхностных мод. Около 55% нижнего состояния в точке \bar{X} локализовано на атомах ступени, испытывающих вертикальные сдвиговые смещения. Это состояние относится к типу E_1 . Второе снизу состояние в значительной степени локализовано на атомах второго слоя, колеблющихся в направлении нормали к поверхности (110). Третье состояние полностью локализовано на атомах ступени и характеризуется горизонтальными сдвиго-

Частоты колебательных состояний (в THz),
найденных на поверхности Al(110) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{S} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота			
		Наст. раб.	Эксперимент [32]	Расчет [9,11]	Расчет [10]
$\bar{\Gamma}$	$Z_1; Z_2$	5.6	-	-	-
\bar{X}	$E_1 \Rightarrow Z_1$	3.4	3.53 ± 0.05	4.2	4.6
	$X_1; Z_2$	3.6	-	4.1	-
	$E_2 \Rightarrow Y_1$	4.4	-	5.5	-
	$Z_1; X_2$	6.0	-	6.0	-
	Y_2	6.0	-	6.3	-
	X_1	6.3	-	7.7	-
\bar{Y}	Y_1	2.76	2.15 ± 0.07	1.9	3.1
	X_1	2.8	-	-	-
	Z_1	3.5	3.26 ± 0.05	3.4	3.3
	X_2	4.1	-	3.6	-
	Z_1, Y_2	4.7	-	-	-
\bar{S}	Y_1	5.5	-	6.0	-
	Y_1	3.3	-	-	-
	Z_1	3.5	-	-	-
	X_1	6.6	-	-	-

Примечание. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями $[\bar{1}10]$, $[001]$ и $[110]$ соответственно.

выми смещениями. Это состояние можно определить как степ-моду E_2 . До 75% четвертого состояния в точке \bar{X} с поперечными горизонтальными смещениями атомов локализуется на втором слое. Пятое состояние лежит в запрещенной щели. По степени локализации на атомах верхнего слоя его можно отнести к степ-моду E_3 . В точке $\bar{\Gamma}$ наблюдается резонансное поверхностное состояние, определяемое в основном вертикальными поперечными смещениями атомов двух верхних слоев. В направлении $\bar{X}\bar{S}$ все состояния являются продолжениями соответствующих состояний в точке \bar{X} . Вдоль $\bar{S}\bar{Y}$ наблюдаются три состояния ниже дна объемных мод колебаний, два состояния в запрещенной щели и одно состояние резонансного типа. В направлении $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ имеется шесть поверхностных состояний.

Приведенный на рис. 9 фононный спектр поверхности Cu(110) почти идентичен фононным спектрам для поверхностей Al(110) и Ag(110). Основные различия связаны с существованием (или отсутствием) отдельных коротких резонансов в симметричных точках. Это видно из табл. 4-6, где также показаны результаты других расчетов и известные экспериментальные данные.

В отличие от поверхностей (311) и (211) колебания, локализованные на ступенях поверхности (110), выражены значительно четче. Особен-

Частоты колебательных состояний (в ТГц), найденных на поверхности Cu(110) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{S} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота				
		Наст. раб.	Эксперимент [25,29,55,56]	Теория		
				[16]	[57]	[20]
$\bar{\Gamma}$	Z_1, Z_2	4.87	4.86; ~ 4.7	~ 4.5	-	-
\bar{X}	$E_1 \Rightarrow Z_1$	2.91	3.14	3.17	2.93	3.26
	$X_1; Z_2$	3.14	-	3.18	3.15	-
	$E_2 \Rightarrow Y_1$	3.80	-	4.41	3.77	-
	Y_2	5.37	-	5.15	-	-
	$X_1; Z_2$	5.88	5.8	5.9	5.6	5.85
\bar{Y}	$Y_1; Z_2$	1.92	1.7	1.71	1.65	2.34
	X_1	2.47	-	2.87	2.45	-
	Z_1	3.01	3.0 ($T = 0$ K)	3.1	2.9	2.98
			2.90			
	X_2	3.64	-	-	-	-
	Y_2	3.82	-	-	-	-
	Y_1	4.66	-	4.88	4.5	4.76
\bar{S}	Y_1	2.69	-	2.81	-	-
	Z_1	2.97	-	3.12	-	-
	X_1	6.18	-	5.69	-	-

Примечание. Смещения атомов X , Y , Z совпадают с направлениями $[\bar{1}10]$, $[001]$ и $[110]$ соответственно.

но это касается моды E_3 . Последнее объясняется тем, что на поверхности (110) мода E_3 попадает в запрещенную щель. При обычной интерпретации результатов без привлечения таких микрообъектов, как одноатомные ступени, моды E_1 , E_2 и E_3 определяются как поверхностные состояния S_1 , S_2 и S_7 соответственно [16,54].

Отметим, что характер смещений атомов по отношению к нормали вицинальной поверхности изменился при переходе от поверхностей с террасами (111) и ступенью (100) к поверхности с террасой (111) и ступенью (111). Если в первом случае мода E_1 описывалась колебаниями атомов с преимущественно горизонтальными поперечными смещениями, а мода E_2 соответствовала в основном колебаниям с вертикальными поперечными смещениями, то во втором случае, наоборот, вертикальные смещения соответствуют моде E_1 , а горизонтальные — моде E_2 .

На рис. 10 показаны рассчитанные дисперсионные кривые для релаксированной 57-слойной пленки Al(331). Нижнее состояние в точке \bar{A} описывает степ-моду E_1 с поперечными смещениями атомов преимущественно вдоль нормали к поверхности. При уменьшении k_x оно превращается в резонанс типа релеевской моды. Второе снизу состояние описывает в основном горизонтально-вертикальные поперечные коле-

Частоты колебательных состояний (в THz), найденных на поверхности Ag(110) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{S} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота	
		Наст. раб.	Эксперимент [54,58]
$\bar{\Gamma}$	$Z_1; Z_2$	3.06	3.12
\bar{X}	$E_1 \Rightarrow Z_1$	1.85	~ 2.0
	$X_1; Z_2$	1.99	~ 2.15
	$E_2 \Rightarrow Y_1$	2.37	-
	X_1	3.49	-
\bar{Y}	$Y_1; Z_2$	1.48	-
	X_1	1.51	-
	Z_1	1.92	-
	Y_2, Z_3	2.51	-
	Y_1	2.98	-
\bar{S}	Y_1	1.72	-
	Z_1	1.87	-
	X_1	3.66	-

П р и м е ч а н и е. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями $[\bar{1}10]$, $[001]$ и $[110]$ соответственно.

бания атомов, расположенных на террасе и лежащих во втором атомном слое. При движении k_x от точки \bar{A} к $\bar{\Gamma}$ это состояние становится третьим по счету снизу и при $k_x \sim 0.5 |\bar{\Gamma A}|$ превращается в резонанс. До 40% третьего состояния в \bar{A} приходится на атомы ступени с преимущественно горизонтальными поперечными смещениями. Поэтому данную моду можно определить как степ-моду E_2 . При уменьшении k_x она становится второй по счету. Четвертое состояние существует только в непосредственной окрестности точки \bar{A} и локализуется на атомах террасы. Пятое состояние в \bar{A} представляет собой степ-моду ME_3 продольных колебаний, до 48% которой локализуется на атомах ступени. При уменьшении k_x ME_3 превращается в объемное состояние. Наконец, шестое состояние — это резонансная мода продольных колебаний, локализованная на атомах террасы, которая в направлении \bar{AB} становится щелевой модой.

В направлении $\bar{\Gamma A}$ имеется несколько коротких резонансов. В направлении \bar{AB} все состояния являются продолжением соответствующих мод, найденных в точке \bar{A} . В направлении $\bar{B Y}$ остаются только две нижние моды. Направление $\bar{\Gamma Y}$ перпендикулярно направлению ступени. Поэтому поперечные горизонтальные колебания состояний с волновым вектором, лежащим вдоль $\bar{\Gamma Y}$, локализованных преимущественно на ступени, соответствуют смещениям атомов вдоль ступени. Таким состоянием является нижняя мода в точке \bar{Y} . Второе состояние описывает колебания, происходящие в сагиттальной плос-

Частоты колебательных состояний (в THz),
найденных на поверхности (331) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{A} , \bar{B} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота			
		Al(331), релакс.	Al(331), нерелакс.	Ag(331), релакс.	Ag(331), нерелакс.
$\bar{\Gamma}$	Y_2, Z_2	3.4	3.3	1.8	1.7
	X_2	3.55	3.3	1.9	1.8
	Y_1, Z_1	4.8	4.6	2.6	2.5
	$Y_1, Z_1; Y_2, Z_2$	6.2	-	3.4	-
\bar{A}	$E_1 \Rightarrow Z_1 > Y_1$	3.3	3.25	1.8	1.8
	$Y_1; Z_2 > Y_1$	3.4	3.35	1.85	1.85
	$E_2 \Rightarrow Y_1 > Z_1$	3.8	3.5	2.05	1.95
	$Y_2; Y_3, Z_3$	5.8	5.7	-	-
	$ME_3 \Rightarrow X_1$	6.6	-	3.7	3.3
	X_2	7.3	6.9	4.0	3.9
\bar{B}	Y_1, Z_1	3.35	3.3	1.8	1.8
	$Y_1, Z_1; Y_2, Z_2$	3.4	3.35	1.85	1.85
	Y_1, Z_1	3.8	3.5	2.05	1.95
	X_1	6.6	-	3.65	3.25
	X_2	-	6.8	4.0	3.85
\bar{Y}	X_1	2.1	1.95	1.1	1.05
	$Y_1, Z_1; Z_3$	2.3	2.25	1.2	1.25
	$Y_1, Z_1; Y_2$	3.65	3.4	2.0	1.55
	$Y_1, Z_1; Y_3$	4.3	-	-	-

Примечание. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями [110], [11 $\bar{6}$] и [331] соответственно.

кости. Два состояния с более высокими частотами являются короткими резонансами, быстро затухающими по обе стороны от точки \bar{Y} . Сравнение результатов расчета для нерелаксированной и релаксированной 57-слойных пленок показывает, что влияние релаксации сводится в основном к четырем факторам. Во-первых, учет релаксации приводит к появлению резонансного поверхностного состояния в псевдощели в точке $\bar{\Gamma}$. Во-вторых, при этом генерируется поверхностное состояние в запрещенной щели. В-третьих, в точке \bar{A} степ-мода E_2 в случае нерелаксированной поверхности попадает в запрещенную щель, образованную поверхностным состоянием, локализованным на атомах террасы, и дном объемных состояний. Это согласуется с результатом Нишпа [3], полученным в рамках более простой модели межатомных взаимодействий. Учет релаксации приводит к смещению моды E_2 в область объемных состояний. В-четвертых, в случае нерелаксированной поверхности Al(331) отсутствует мода ME_3 . Отметим, что на нерелаксированной поверхности Ag(331) такая мода существует. Что касается фононных спектров релаксированных поверхностей Ag(331) и

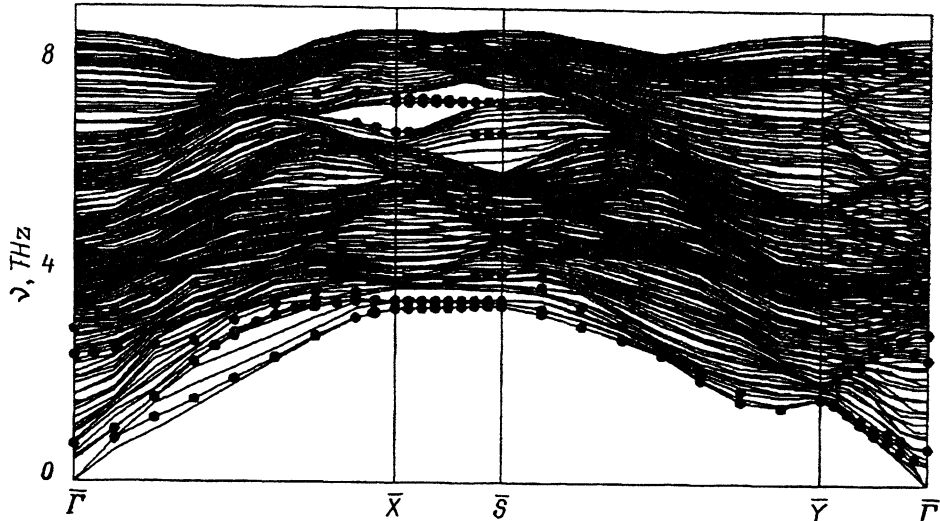


Рис. 11. То же, что и на рис. 4, для 72-слойной пленки Al(221).

Al(331), то они аналогичны. Некоторые различия могут быть связаны с существованием отдельных резонансов. Частоты поверхностных состояний в отдельных точках двумерной зоны Бриллюэна для этих поверхностей приведены в табл. 7.

Суммируя полученные результаты для поверхности (331), можно отметить существование степ-мод E_1 , E_2 и ME_3 , причем мода E_2 попадает в случае релаксированной поверхности в область объемных состояний. Кроме этих мод наблюдаются поверхностные состояния, локализованные преимущественно на атомах террасы. Имеется ряд резонансов, один из которых наблюдается в псевдощели.

На рис. 11 показаны вычисленные дисперсионные кривые для релаксированной 72-слойной пленки Al(221). В направлении $\overline{\Gamma X}$ наблюдается ряд поверхностных состояний. Нижнее из них в точке \overline{X} является типичной степ-модой E_1 , до 55% локализованной на атомах ступени. Его поляризация определяется в основном горизонтальными сдвиговыми смещениями с добавками вертикальных движений. Второе и третье снизу состояния имеют практически одну и ту же частоту 3.5 THz и представляют собой релеевские моды. Вторая мода локализована до 50% на атомах террасы, лежащих в третьем атомном слое. Имеется также небольшая доля состояния (15%), приходящаяся на первый атомный слой. Третья мода до 55% локализована на атоме террасы, принадлежащем второму слою. Четвертое состояние лежит в нижней части запрещенной щели и соответствует резонансной степ-моду ME_3 с продольными колебаниями атомов ступени и атомов террасы. До 35% состояния локализуется на ступени, на четвертый атомный слой приходится 24%. Пятое и шестое состояния являются щелевыми продольными модами, локализованными в основном на атомах террасы. При уменьшении k_x мода E_1 попадает в область объемных состояний и становится резонансом — вторым снизу состоянием. Нижняя мода вдоль направления $\overline{\Gamma X}$ является релеевской. Мода ME_3 при $k_x \sim 0.85 |\overline{\Gamma X}|$ перемещивается с объемными состояниями

и полностью теряет поверхностный характер. В точке $\bar{\Gamma}$ наблюдаются два состояния, локализованные в значительной степени на ступени. Верхнее — с частотой 2.8 THz — является продольной модой. Нижнее состояние — с частотой 2.5 THz — характеризуется поперечными горизонтально-вертикальными смещениями атомов и представляет собой моду E_1 . Каждое из этих состояний в свою очередь является резонансом, представляющим собой совокупность из двух состояний, различающихся по частоте на величину ~ 0.1 THz. Состояние с поперечной горизонтальной поляризацией и частотой 0.4 THz в $\bar{\Gamma}$ является началом второй снизу ветви в направлении $\bar{\Gamma}\bar{X}$. При увеличении волнового вектора частота верхнего состояния быстро увеличивается, тогда как состояние с $\nu = 2.5$ THz остается практически бездисперсионным. В направлении $\bar{X}\bar{S}$ почти все состояния являются продолжением соответствующих состояний в точке \bar{X} . Появляется только одно новое состояние частотой 4.0 THz в точке \bar{S} , которое локализовано в основном на ступени и характеризуется поперечными горизонтально-вертикальными смещениями атомов. Нижняя мода в направлении $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ описывает колебания атомов вдоль ступени. Вторая мода в точке \bar{Y} определяется колебаниями атомов трех верхних слоев, происходящими в сагиттальной плоскости. Другие состояния вдоль $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ являются продолжением соответствующих состояний в точке $\bar{\Gamma}$.

Расчет нерелаксированной 72-слойной пленки Al(221) показал, что в направлении $\bar{\Gamma}\bar{X}$ спектры релаксированной и идеальной поверхности похожи. Различие вызвано в основном тремя факторами. Во-первых, на релаксированной поверхности отсутствует поверхностный резонанс с частотой ~ 5.7 THz, лежащий в интервале $0.6|\bar{\Gamma}\bar{X}| \leq k_x \leq 0.9|\bar{\Gamma}\bar{X}|$. Во-вторых, на идеальной поверхности в точке \bar{X} имеется степ-мода E_2 , 50% которой приходится на первый атомный слой. Поляризация состояния E_2 определяется поперечными горизонтально-вертикальными смещениями атомов первого и третьего слоев. В-третьих, на идеальной поверхности отсутствует мода ME_3 продольных колебаний. Рассчитанный фононный спектр релаксированной 72-слойной пленки Ag(221) оказался подобным таковому для релаксированной поверхности Al(221). Основное отличие связано с тем, что на поверхности Ag(221) в точке \bar{X} появляется степ-мода E_2 . Частоты поверхностных состояний в симметричных точках приведены в табл. 8 для Ag(221) и Al(221).

Интересно сравнить полученные результаты с экспериментом [59] и расчетами [3, 38]. Блэк и Бопп вычисляли спектр нерелаксированной поверхности Ni(221) в симметричных точках \bar{X} , \bar{Y} и \bar{S} . При этом использовалась одна силовая постоянная, описывающая взаимодействие ближайших соседей. В точке \bar{X} они обнаружили частоты, соответствующие модам E_1 , E_2 и ME_3 , что согласуется с нашими результатами. Однако кроме этих мод мы обнаружили также состояния, локализованные на атомах террасы. В точке \bar{S} авторы [38] нашли три поверхностные моды, в то время как настоящий расчет дает семь состояний. В \bar{Y} мы обнаружили две моды в отличие от трех, найденных в [38]. Нишп [3] анализировал поведение степ-мод в коротковолновой области и не

Частоты колебательных состояний (в THz),
найденных на поверхности (221) в точках $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{S} и \bar{Y}

Точка	Поляризация	Частота		
		Al(221), релакс.	Al(221), нерелакс.	Ag(221), релакс.
$\bar{\Gamma}$	$Y_1, Z_1; Y_3, Z_3; Y_4, Z_4$	2.5	2.4	1.3
	X_1, X_3	2.8	-	1.4
	X_2	-	3.2	-
\bar{X}	$E_1 \Rightarrow Y_1 > Z_1; Y_3, Z_3$	3.3	3.25	1.8
	$Z_1; Z_3$	3.5	3.35	1.9
	Z_2	3.5	3.4	1.9
	$E_2 \Rightarrow Y_1, Z_1; Y_3, Z_3$	-	3.5	2.0
	$ME_3 \Rightarrow X_1; X_4$	6.7	-	3.7
	X_2	7.25	6.9	4.05
	X_3	7.3	7.1	4.1
\bar{S}	Y_1, Z_1	3.35	3.3	1.8
	$Z_3 > Y_3$	3.4	3.35	1.85
	Z_2	3.5	3.45	1.9
	Y_1, Z_1	4.0	3.55	2.15
	X_1, X_4	6.65	-	3.65
	X_2, Z_3	7.0	6.8	3.95
	X_3	7.1	7.0	4.0
\bar{Y}	$X_1; X_2$	1.65	1.55	0.9
	$Y_1, Z_1; Y_2, Z_2; Y_3, Z_3$	3.0	2.9	1.6

П р и м е ч а н и е. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями $[\bar{1}10]$, $[\bar{1}\bar{1}4]$ и $[221]$ соответственно.

рассматривал окрестность точки $\bar{\Gamma}$. Две моды в $\bar{\Gamma}$, найденные нами для релаксированных поверхностей, являются резонансными степ-модами, локализованными на ступени и медленно убывающими в глубь пленки. Лок и др. [59] обнаружили в $\bar{\Gamma}$ резонансную степ-моду с вертикальными поперечными смещениями атомов, которая распространяется вдоль \bar{X} направления без какой-либо дисперсии до $k_x \sim 0.4|\bar{X}|$, что хорошо согласуется с поведением нижней из двух степ-мод вблизи $\bar{\Gamma}$. Авторы [59] обнаружили эту степ-моду также в направлении \bar{Y} при малых значениях волнового вектора k_y . Метод неупругого рассеяния атомов гелия позволяет обнаружить только поверхностные состояния, характеризующиеся колебаниями атомов в сагиттальной плоскости, проходящей через волновой вектор и нормаль к поверхности. Поэтому только нижняя степ-мода может быть определена в обоих направлениях методом HAS. Верхняя мода при малых k_y характеризуется поперечными горизонтальными смещениями атомов. Частота 2.5 THz нижней степ-моды в $\bar{\Gamma}$ согласуется с экспериментальным значением 2.6–2.7 THz [59].

Итак, в рамках пленочной модели впервые проведенные расчеты фоновых дисперсионных кривых для поверхностей алюминия, меди и серебра (211), (311), (331) и (221). Потенциалы межатомного взаимодействия строились с использованием МПА. Поверхностные состояния изучались как на релаксированных, так и на идеальных поверхностях. На всех рассматриваемых поверхностях были найдены моды, локализованные на ступенях. Имеются также состояния, локализованные на террасах. В отличие от поверхностей с низкими индексами (100) и (111) на вицинальных поверхностях, включая поверхность (110), наблюдаются состояния в точке $\bar{\Gamma}$. Сравнение полученных результатов для релаксированных и идеальных поверхностей показывает, что учет релаксации может приводить к появлению или исчезновению отдельных поверхностных состояний, изменению степени локализации состояния и его частоты. Отметим, что, несмотря на значительное подобие спектров однотипных поверхностей алюминия, серебра и меди, наблюдаются различия в количестве поверхностных состояний. Сравнение настоящих результатов с имеющимся экспериментом для поверхности Al(221) [59] позволяет сделать вывод о хорошем согласии теоретических и экспериментальных данных. Для проверки других полученных результатов желательно проведение измерений методом неупругого рассеяния атомов гелия и высокоразрешающей спектроскопии потерь энергии электронов.

Список литературы

- [1] Van Hove M.A., Somorjai G.A. Surf. Sci. **92**, 489 (1980).
- [2] Knipp P. Phys. Rev. **B40**, 7993 (1989).
- [3] Knipp P. Phys. Rev. **B43**, 6908 (1991).
- [4] Ibach H. Surf. Sci. **299/300**, 116 (1994).
- [5] Benedeck G., Toennies J.P. Surf. Sci. **299/300**, 587 (1994).
- [6] Allen R.F., Alldredge G.P., de Wette F.W. Phys. Rev. **4**, 1648 (1971).
- [7] Cheng D.J., Wallis R.F., Dobrzynski L. Surf. Sci. **43**, 400 (1974).
- [8] Black J.E., Shanes F.C., Wallis R.F. Surf. Sci. **133**, 199 (1983).
- [9] Ho K.M., Bohnen K.P. Phys. Rev. Lett. **56**, 934 (1986).
- [10] Eguluz A.G., Maradudin A.A., Wallis R.F. Phys. Rev. Lett. **60**, 309 (1988).
- [11] Bohnen K.P., Ho K.M. Surf. Sci. **207**, 105 (1988).
- [12] Gaspar J.A., Eguluz A.G. Phys. Rev. **B40**, 11976 (1989).
- [13] Rodach T., Bohnen K.P., Ho K.M. Surf. Sci. **209**, 481 (1989).
- [14] Quong A.A., Maradudin A.A., Wallis R.F., Gaspar J.A., Eguluz A.G., Alldredge G.P. Phys. Rev. Lett. **66**, 743 (1991).
- [15] Chen Y., Tong S.Y., Bohnen K.P., Rodach T., Ho K.M. Phys. Rev. Lett. **70**, 603 (1993).
- [16] Rodach T., Bohnen K.P., Ho K.M. Surf. Sci. **296**, 123 (1993).
- [17] Ningsheng L., Wenlan X., Shen S.C. Solid State Commun. **67**, 837 (1988).
- [18] Nelson J.S., Daw M.S., Sowa E.C. Phys. Rev. **B40**, 1454 (1989).
- [19] Yang L., Rahman T.S., Daw M.S. Phys. Rev. **B44**, 13725 (1991).
- [20] Ditlevsen P.D., Norskov J.K. Surf. Sci. **254**, 261 (1991).
- [21] Берч А.В., Еремеев С.В., Липницкий А.Г., Складнева И.Ю., Чулков Е.В. ФТТ **36**, 10, 2935 (1994).
- [22] Chulkov E.V., Sklyadneva I.Yu. Surf. Sci. In press (1995).
- [23] Bertsch A.V., Chulkov E.V., Eremeev S.V., Lipnitskii A.G., Rusina G.G., Sklyadneva I.Yu. Vacuum. In press (1995).
- [24] Lahee A.M., Toennies J.P., Woll Ch. Surf. Sci. **191**, 529 (1987).
- [25] Baddorf A.P., Plummer E.W. Phys. Rev. Lett. **66**, 2770 (1991).
- [26] Lehwald S., Wolf F., Ibach H., Hall B.M., Mills D.L. Surf. Sci. **192**, 131 (1987).
- [27] Balden M., Lehwald S., Ibach H., Ormeci A., Mills D.L. Phys. Rev. **B46**, 4172 (1992).

- [28] Yater J.E., Kulkarni A.D., de Wette F.W., Erskine J.L. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **54/55**, 395 (1990).
- [29] Zeppenfeld P., Kern K., David R., Kuhnke K., Gomsa G. *Phys. Rev.* **B38**, 12329 (1988).
- [30] Chen Y., Tong S.Y., Kim J.S., Kesmodel L.L., Rodach T., Bohnen K.P., Ho K.M. *Phys. Rev.* **B44**, 11394 (1991).
- [31] Mohamed M.H., Kesmodel L.L. *Phys. Rev.* **B37**, 6519 (1988).
- [32] Toennies J.P., Woll Ch. *Phys. Rev.* **B37**, 4475 (1987).
- [33] Lock A., Toennies J.P., Woll Ch., Bortolani V., Franchini A., Santoro G. *Phys. Rev.* **B37**, 7087 (1988).
- [34] Black J.E., Franchini A., Bortolani V., Santoro G., Wallis R.F. *Phys. Rev.* **B36**, 2996 (1987).
- [35] Daw M.S., Baskes M.I. *Phys. Rev.* **B29**, 6443 (1984).
- [36] Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. *Phys. Rev.* **B33**, 7983 (1986).
- [37] Armand G., Masri P. *Surf. Sci.* **130**, 89 (1983).
- [38] Black J.E., Bopp P. *Surf. Sci.* **140**, 275 (1984).
- [39] Tian Z.J., Black J.E. *Surf. Sci.* **303**, 395 (1994).
- [40] Kohn W., Sham L.J. *Phys. Rev.* **A410**, 1133 (1965).
- [41] Hedin L., Lundqvist B.I. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4**, 2062 (1971).
- [42] Nielsen H.B., Andersen J.F., Petersen L., Adams D.L. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **15**, L1113 (1982).
- [43] Ho K.M., Bohnen K.P. *Phys. Rev.* **B32**, 3446 (1985).
- [44] Davis H.L., Nooman J.R. *Surf. Sci.* **126**, 245 (1983).
- [45] Kuk Y., Feldman L.C. *Phys. Rev.* **B30**, 5811 (1984).
- [46] Holub-Krappe E., Horn K., Frenken J.W.M., Krans R.L., Van der Veen. *Surf. Sci.* **188**, 335 (1987).
- [47] Adams D.L., Nielsen H.B., Andersen J.N., Stensgaard I., Feidenhansl R., Sorensen J.E. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 669 (1982).
- [48] Adams D.L., Sorensen C.S. *Surf. Sci.* **166**, 495 (1986).
- [49] Nelson J.S., Feibelman P. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2188 (1992).
- [50] Noonan J.R., Davis H.L., Erley W. *Surf. Sci.* **152**, 142 (1985).
- [51] Watson P.R., Mitchell K.A.R. *Surf. Sci.* **203**, 323 (1988).
- [52] Parhin S.R., Watson P.R., McFarlane R.A., Mitchell K.A.R. *Solid State Commun.* **78**, 841 (1991).
- [53] Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В., Поверхность, **6**, 23 (1994).
- [54] Bracco G., Taterek R., Tommasini F., Linke V., Persson M. *Phys. Rev.* **B36**, 2928 (1987).
- [55] Mason B.F., McGreer K., Williams B.R. *Surf. Sci.* **130**, 282 (1983).
- [56] Stroschio J.A., Persson M., Bare S.H., Ho W. *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1428 (1985).
- [57] Yang L., Rahman T.S. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2327 (1991).
- [58] Persson M., Stroschio J.A., Ho W. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **38**, 11 (1986).
- [59] Lock A., Toennies J.P., Witte G. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **54/55**, 309 (1990).