

ВИБРАЦИОННЫЕ МОДЫ НА ПОВЕРХНОСТЯХ ПАЛЛАДИЯ С НИЗКИМИ ИНДЕКСАМИ

© Г.Г.Русина, И.Ю.Скляднева, Е.В.Чулков

Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук,
634021 Томск, Россия
(Поступила в Редакцию 13 декабря 1995 г.)

В модели погруженного атома проведены расчеты вибрационных мод на поверхностях Pd (100), Pd (110) и Pd (111). Найдено, что в случае поверхности Pd (111) наблюдается отличное согласие рассчитанной и экспериментальной частот релеевской моды в точке \bar{K} . Несколько худшее согласие с имеющимися экспериментальными данными получено для поверхностей (110) и (100).

В отличие от поверхностей меди и серебра с низкими индексами Миллера, для которых исследования вибрационных мод проводились как экспериментально [1-7], так и теоретически [1,4,8-12], поверхности палладия (100), (110) и (111) изучались только экспериментально. Чен и Кесмодел [13] измерили методом высокоразрешающей спектроскопии потерь энергии электронов (HREELS) дисперсию релеевской моды вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$ для поверхности (100). Лахи и др. [14] исследовали методом неупругого рассеяния атомов гелия (HAS) вибрационные моды на поверхности палладия (110). Дисперсия релеевской моды вдоль $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -направления поверхности (111) изучалась в работе [15]. Обычно методами HAS и HREELS определяются только продольные поверхностные моды и моды, характеризующиеся вертикальной поперечной поляризацией. Причем методом неупругого рассеяния атомов гелия измеряются в основном низкочастотные моды колебаний. Теоретическая трактовка экспериментальных результатов дается, как правило, в простейших моделях силовых постоянных, подогнанных под эмпирические данные для объемных образцов с последующим изменением силовой постоянной, описывающей взаимодействие ближайших соседей в поверхностном слое, с целью воспроизвести экспериментальное поведение релеевской моды.

В настоящей работе представляются результаты детального расчета, выполненного в рамках метода погруженного атома (МПА), для трех поверхностей палладия с низкими индексами Миллера. Предварительные краткие результаты МПА-расчета для поверхности Pd (110) приведены в работе [12].

В методе погруженного атома потенциальная энергия записывается в виде [16]

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

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 расчете функции погружения мы использовали зарядовую плотность свободного атома, вычисленную в приближении локальной плотности [17,18]. Параметры метода подгонялись под экспериментальные данные палладия по энергии сублимации, равновесному объему, трем модулям упругости и энергии образования вакансии [16]. Равновесное положение поверхностных слоев (релаксированная геометрия) находилось методом молекулярной динамики при нулевой температуре. Фононные поверхностные состояния вычислялись в модели тонких пленок. Отметим, что генерируемые в данной работе многочастичные потенциалы учитывают взаимодействия атомов до четвертой координационной сферы включительно.

2. Результаты расчета. Обсуждение

1) Вибрационные моды на поверхности Pd(100). Расчет равновесного положения атомных слоев на поверхности (100) показал, что первое межслоевое расстояние уменьшается, в то время как второе слегка расширяется. Их относительные изменения составляют $\Delta_{12} = -3.1\%$, $\Delta_{23} = +0.1\%$. Этот типичный результат, получаемый в методе погруженного атома для поверхности (100) ГЦК-металлов [16,19,20], объясняется отсутствием процедуры получения самосогласованной зарядовой плотности для построения функции погружения. В случае Cu(100), Ni(100) и Ag(100) результаты МПА-расчета согласуются с экспериментальными данными [16,19], в то время как для поверхности Pd(100) эксперименты указывают на небольшое расширение первого межслоевого расстояния: $\Delta_{12} = 2.5 \pm 2.5\%$ [21], $\Delta_{12} = 3 \pm 1.5\%$ [22]. В силу небольшой величины релаксации следует ожидать, что эти различия не приведут к качественным изменениям в фононной структуре поверхности Pd(100). Изменения поверхностной энергии, связанные с релаксацией, составляют всего 20 mJ/m^2 (1.7% от величины поверхностной энергии) [19].

На рис. 1 показаны рассчитанные дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Pd(100). Поверхностные состояния отмечены черными кружками. Из этого рисунка видно, что вдоль $\Gamma\bar{X}$ -направления имеются три поверхностных состояния. Нижнее из них характеризуется поперечными горизонтальными смещениями атомов верхних слоев. При увеличении волнового вектора усиливается

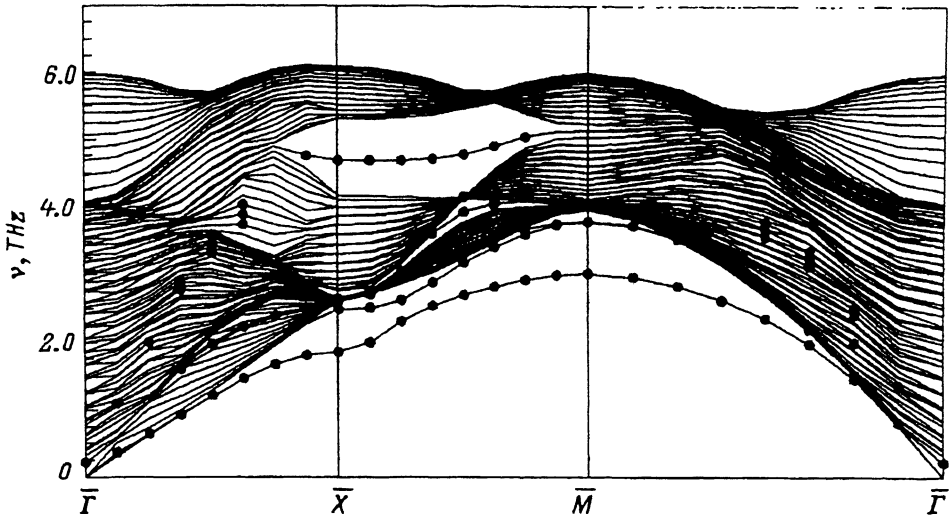


Рис. 1. Рассчитанные фононные дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Pd(100).

Поверхностные состояния представлены черными кружками.

локализация состояния в поверхностном слое, и в точке \bar{X} оно полностью локализовано в верхнем слое. Его частота в точке \bar{X} составляет 1.86 THz. Второе состояние представляет собой типичную релеевскую моду с колебаниями атомов в сагиттальной плоскости с преобладающей вертикальной компонентой. Частота этой моды в \bar{X} составляет 2.5 THz. Третье состояние представляет собой группу из нескольких поверхностных резонансов преимущественно продольной поляризации с небольшой примесью смещений атомов поверхностного слоя в направлении z , различающихся между собой по частоте на 0.1–0.2 THz. В точке \bar{X} наблюдается несколько поверхностных состояний. Третье снизу состояние с частотой 2.65 THz полностью локализуется на втором слое и характеризуется горизонтальными поперечными смещениями атомов этого слоя. Имеется также состояние с частотой 2.61 THz, локализованное на третьем атомном слое с поперечной горизонтальной поляризацией. Верхнее состояние (с продольными смещениями атомов поверхностного слоя) лежит в запрещенной щели.

В направлении $\bar{\Gamma M}$ имеются три поверхностных состояния. Нижнее представляет собой релеевскую моду. Второе состояние характеризуется продольными смещениями атомов двух верхних слоев. Третье состояние определяется группой поверхностных резонансов преимущественно продольной поляризации. В точке \bar{M} наблюдаются три состояния, верхнее из которых локализовано преимущественно на атомах второго слоя, колеблющихся в вертикальном направлении. Вдоль направления $\bar{X}\bar{M}$ имеются пять поверхностных состояний, два нижних являются продолжением соответствующих состояний, распространяющихся вдоль направления $\bar{\Gamma M}$.

В табл. 1 показаны вычисленные значения частот в симметричных точках \bar{X} и \bar{M} . Здесь же для сравнения приведены результаты МПА-расчета для нерелаксированной поверхности и поверхности с

Частоты вибрационных мод на поверхности Pd(100) в симметричных точках \bar{X} и \bar{M}

Симметричная точка	Мода	Частота, ТГц				
		Настоящая работа		Эксперимент (релаксированная)	Эксперимент [13]	Расчет [13]
		Нерелаксированная	Релаксированная			
\bar{X}	Y1	1.64	1.86	1.37	—	—
	Z1	2.43	2.50	2.29	2.7	2.7
	Y3	—	2.61	2.60	—	—
	Y2	2.48	2.65	2.29	—	—
	X1, Z2	4.40	4.70	5.24	—	5.4—5.7
\bar{M}	Z1	2.83	3.03	2.55	—	1.5—2.2
	L1	3.70	3.80	3.53	—	—
	Z2	3.90	4.10	3.64	—	—

Примечание. Атомные смещения X, Y и Z соответствуют направлениям [110], $[\bar{1}10]$ и [001]. Цифры 1, 2 и 3 описывают номер поверхностного слоя, смещения которого в основном определяют данное состояние.

увеличенным на 3% первым межслоевым расстоянием, а также частоты, рассчитанные в [13] с использованием силовых постоянных, которые получены подгонкой под значения, дающие экспериментальную величину частоты релеевской моды в точке \bar{X} [13]. Из таблицы видно, что в случае релаксированной поверхности, соответствующей равновесному положению атомных слоев, частоты поверхностных состояний выше, чем в случае нерелаксированной (идеальной) поверхности и поверхности с экспериментальным значением первого межслоевого расстояния (исключением является верхняя щелевая мода в точке \bar{X}). Это совершенно логичный результат, получаемый в методе погруженного атома. Увеличение первого межслоевого расстояния приводит к ослаблению межслоевого взаимодействия и соответственно к уменьшению частот поверхностных состояний. Сравнение с экспериментом показывает, что настоящий расчет воспроизводит экспериментальное значение частоты релеевской моды в точке \bar{X} с точностью до 0.2 ТГц. Использование различных моделей силовых постоянных в [13], полученных подгонкой под значения, расчеты на основе которых дают экспериментальные значения частот спектра объемных фононов и частоту релеевской моды в точке \bar{X} , приводит только к качественному согласию с нашими результатами. Таким образом, для проверки полученных в настоящей работе результатов желательно проведение дополнительных измерений вибрационных мод на поверхности Pd(100).

2) В и б р а ц и о н н ы е м о д ы н а п о в е р х н о с т и Pd(110). Расчет равновесного положения атомных слоев для поверхности Pd(110) дает $\Delta_{12} = -8.3\%$, $\Delta_{23} = +1.0\%$, $\Delta_{34} = -0.5\%$, что согласуется с измерениями методом дифракции медленных электронов ($\Delta_{12} = -5.7 \pm 2\%$, $\Delta_{23} = +0.5 \pm 2\%$) [23]. Это типичный резуль-

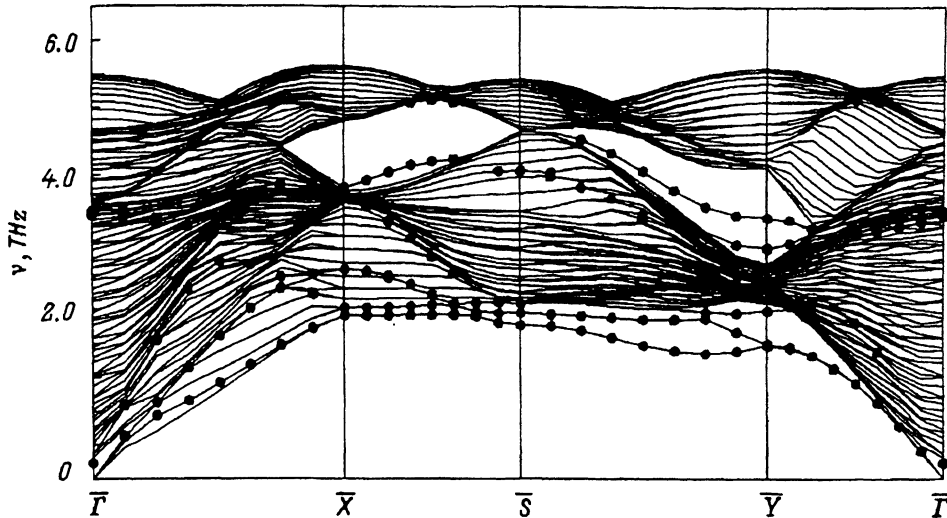


Рис. 2. Рассчитанные фононные дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Pd(110).

тат, получаемый в модели погруженного атома для поверхности (110) ГЦК-металлов [16,19]. На рис. 2 приведены вычисленные дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Pd(110). Из этого рисунка видно, что вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$ имеются пять поверхностных состояний. Нижнее из них является обычной релеевской модой. Второе состояние характеризуется горизонтальными сдвиговыми смещениями атомов двух верхних слоев. В точке $\bar{\Gamma}$ ($k_x \approx 0.05\bar{\Gamma}\bar{X}$) частота этого состояния составляет 0.23 THz. При увеличении волнового вектора возрастает локализация данного состояния на первом слое. В точке \bar{X} оно становится третьим снизу и полностью локализуется на атомах поверхностного слоя. Третье состояние при малых значениях волнового вектора характеризуется продольными смещениями атомов. При увеличении k_x доля продольной составляющей уменьшается и возрастает доля сдвиговых вертикальных смещений. Одновременно происходит перераспределение локализации состояния: уменьшается квадратичная амплитуда смещений для атомов верхнего слоя и возрастает для атомов второго слоя. В точке \bar{X} это состояние становится вторым по счету и определяется вертикальными смещениями атомов второго слоя. Только 8% состояния локализуется на атомах верхнего слоя, колеблющихся в продольном направлении. Четвертое состояние с частотой 3.95 THz в точке $\bar{\Gamma}$ распространяется вдоль $\bar{\Gamma}\bar{X}$ до $k_x \approx 0.25\bar{\Gamma}\bar{X}$ и характеризуется в основном поперечными вертикальными смещениями атомов двух верхних слоев. С увеличением волнового вектора уменьшается доля вертикальных смещений и возрастает доля продольной составляющей.

В направлении $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ наблюдаются шесть поверхностных состояний и один короткий резонанс в высокочастотной области спектра. Два нижних состояния практически не различаются по частоте. Поляризация одного из них определяется смещениями атомов двух верхних слоев в сагиттальной плоскости. Второе характеризуется поперечны-

ми горизонтальных смещений атомов двух верхних слоев. Причем с увеличением волнового вектора усиливается локализация на первом слое, достигая 100% в точке \bar{Y} . Третье состояние представляет собой преимущественно продольно-поляризованную моду в средней части направления $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ с небольшой примесью z -смещений. С увеличением волнового вектора доля вертикальных смещений возрастает, и в точке \bar{X} это состояние определяется z -смещениями атомов поверхностного слоя. Четвертое и пятое состояния лежат в запрещенной щели. Нижнее из них локализуется в основном на атомах второго и третьего слоев, колеблющихся соответственно в продольном и вертикальном направлениях. Пятое состояние является типичной щелевой модой с продольными смещениями атомов поверхностного слоя и поперечными вертикальными смещениями атомов второго слоя. Шестое состояние является продолжением z -поляризованной моды в точке $\bar{\Gamma}$. Седьмое состояние представляет собой короткий резонанс с частотой 5.65 THz, лежащий в средней части направления $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ и локализованный в основном на атомах второго и третьего слоев, колеблющихся в продольном направлении.

Вдоль направления $\bar{X}\bar{S}$ имеются шесть состояний. Три нижних являются продолжением соответствующих состояний, распространяющихся вдоль $\bar{\Gamma}\bar{X}$. Четвертое состояние локализуется преимущественно на втором и третьем слоях и характеризуется поперечными горизонтальными смещениями атомов. Пятое состояние является щелевой модой. Шестое представляет собой короткий продольный резонанс, лежащий в средней части $\bar{X}\bar{S}$ и локализованный преимущественно на атомах второго слоя.

В направлении $\bar{S}\bar{Y}$ наблюдаются семь состояний. Три нижних и два верхних в окрестности точки \bar{Y} являются продолжением соответствующих состояний в направлении $\bar{\Gamma}\bar{Y}$. Четвертое состояние с частотой 2.9 THz представляет собой короткий резонанс, локализованный в основном на втором слое. Четвертое состояние в точке \bar{S} локализуется в основном в трех верхних слоях и распространяется до середины направления $\bar{S}\bar{Y}$.

В табл. 2 показаны рассчитанные частоты поверхностных мод в симметричных точках для релаксированной и идеальной (нерелаксированной) поверхностей Pd(110). Для сравнения приведены также экспериментальные результаты, полученные методом дифракции атомов гелия [14]. Из таблицы видно, что учет релаксации приводит к увеличению частот всех поверхностных состояний (исключение составляют щелевая мода в точке \bar{X} и незначительное уменьшение частоты второго нижнего состояния в точке \bar{Y}). Существенное изменение частоты щелевой моды в точке \bar{X} может быть объяснено в рамках понятия поверхностного состояния как состояния, вызванного отщеплением соответствующей моды от континуума объемных состояний при образовании поверхности. Если в случае релаксированной поверхности щелевая мода может рассматриваться как отщепленная от объемных состояний, лежащих в окрестности нижнего края щели, то в случае идеальной поверхности эту моду можно рассматривать как отщепленную от объемных состояний, соответствующих верхнему краю щели. В случае нерелаксированной поверхности эта мода лежит вблизи верхнего края щели.

Частоты вибрационных мод поверхности Pd(110) в симметричных точках $\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{S} и \bar{Y}

Симметричная точка	Мода	Частота, THz		
		Настоящая работа		Эксперимент [14]
		Релаксированная	Нерелаксированная	
$\bar{\Gamma}$	Z1, Z2	3.95	3.80	4.1
\bar{X}	Z1, Z3	2.5	2.4	≈ 2.6
	Z2	2.6	2.6	≈ 2.8
	Y1	3.1	2.7	—
	Y2, Y4	4.2	—	—
	X1	4.35	5.25	—
\bar{Y}	X1	1.9	1.75	—
	Y1, Z2	1.95	2.0	≈ 1.65
	Z1	2.4	2.3	≈ 2.25
	X2, X4	2.9	2.6	—
	Y2, Z3	3.4	2.9	—
	Y1, Z2	3.9	3.4	—
	Y1	2.3	2.1	—
\bar{S}	Z1, Z3	2.45	2.35	—
	X1, Y2	2.6	2.45	—
	X1, Y2	4.55	4.05	—
	X1, Y2	4.55	4.05	—

П р и м е ч а н и е. Смещения атомов X, Y, Z совпадают с направлениями [110], [001] и [110] соответственно.

Сравнение с экспериментом [14] показывает, что в целом наблюдается хорошее согласие между теоретическими и HAS-данными. В то же время имеются небольшие количественные различия. Так, в точках $\bar{\Gamma}$ и \bar{X} рассчитанные частоты меньше экспериментальных на 0.1–0.2 THz, а в точке \bar{Y} вычисленные частоты на 0.2–0.3 THz выше экспериментальных данных. Следует отметить, что такое соотношение между теоретическими и экспериментальными результатами не является присущим только поверхности Pd(110). Это вполне типичный результат, полученный в модели погруженного атома для поверхности (110) ГЦК-металлов [12].

3) В и б р а ц и о н н ы е м о д ы н а п о в е р х н о с т и Pd(111). Расчет равновесного положения атомных слоев поверхности Pd(111) дает $\Delta_{12} = -2.2\%$ и $\Delta_{23} = +0.2\%$. Нам не удалось найти какие-либо эксперименты и расчеты по определению релаксированной геометрии поверхности (111) палладия. Имеется только один расчет [16], выполненный также в модели погруженного атома, но с электронной плотностью свободного атома, полученной методом Хартри–Фока. Фойлс и др. [16] получили $\Delta_{12} = -3.2\%$ и $\Delta_{23} = +0.3\%$, что хорошо согласуется с нашими результатами.

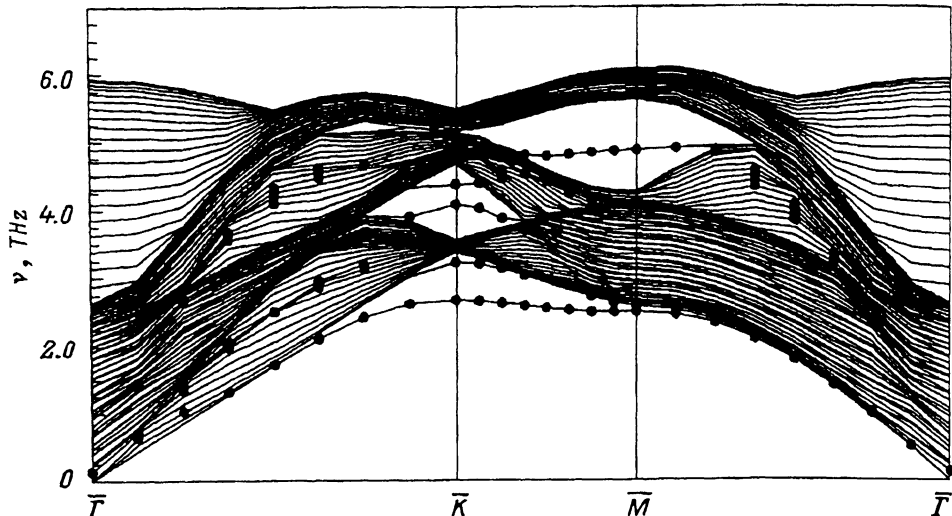


Рис. 3. Рассчитанные фоновые дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Pd(111).

На рис. 3 показаны вычисленные дисперсионные кривые для релаксированной 30-слойной пленки Pd(111). По-видимому, наиболее интересным направлением, вдоль которого наблюдается наибольшее количество поверхностных состояний, является направление $\bar{\Gamma}\bar{K}$ и окрестность точки \bar{K} . Нижнее состояние представляет собой релеевскую моду с вертикальными смещениями атомов. При увеличении волнового вектора усиливается локализация состояния на верхнем слое и в точке \bar{K} , 92% состояния локализуется на атомах поверхностного слоя. Второе состояние вдоль $\bar{\Gamma}\bar{K}$ характеризуется смещениями атомов поверхностного слоя в плоскости, перпендикулярной волновому вектору. При малых волновых векторах это состояние определяется в основном поперечными горизонтальными смещениями атомов верхних слоев. Вдоль $\bar{\Gamma}\bar{K}$ оно распространяется до $k_x \approx 0.80|\bar{\Gamma}\bar{K}|$. Третье состояние представляет собой группу резонансов с продольной поляризацией, отличающихся друг от друга на 0.1–0.2 ТГц. Вблизи точки \bar{K} появляются три поверхностных состояния, лежащих вне области объемного спектра. Нижнее из них (второе снизу в точке \bar{K}) локализуется в основном на первых двух слоях и характеризуется смещениями атомов верхнего слоя в плоскости поверхности и поперечными вертикальными смещениями атомов второго слоя. Два других лежат в запрещенной щели. Нижнее из них локализуется в основном (94%) на верхнем слое, атомы которого колеблются в плоскости поверхности. Верхнее определяется преимущественно продольными смещениями атомов верхнего слоя и вертикальными смещениями атомов второго слоя.

Вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{M}$ имеются четыре поверхностных состояния. Частоты двух нижних различаются не более чем на 0.1 ТГц. Нижнее из этих состояний представляет собой релеевскую волну. Вторая мода имеет существенную долю продольных смещений. Третье состояние представляет собой группу резонансных мод, частоты которых различаются на 0.1–0.2 ТГц, а атомы смещаются в плоскости поверхности.

Частоты вибрационных мод на поверхности Pd (111) в симметричных точках \bar{K} и \bar{M}

Симметричная точка	Мода	Частота, THz		
		Настоящая работа		Эксперимент [15]
		Нерелаксированная	Релаксированная	
\bar{K}	Z1	2.65	2.7	2.7
	(XY)1Z2	3.2	3.2	—
	X1	4.05	4.1	—
	(XY)1Z2	4.35	4.4	—
\bar{M}	Z1	2.45	2.5	—
	(XY)1	2.6	2.6	—
	(XY)1	4.8	4.85	—

П р и м е ч а н и е. Смещения атомов X, Y и Z совпадают с направлениями $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$ и $[111]$ соответственно.

Четвертое состояние лежит в запрещенной щели и характеризуется смещениями атомов в плоскости поверхности.

В табл. 3 приведены частоты поверхностных состояний, вычисленные для релаксированной и нерелаксированной поверхностей Pd (111), а также экспериментальное значение частоты релеевской моды в точке \bar{K} [15]. Из таблицы видно, что учет релаксации приводит к незначительному изменению частоты, что обусловлено малой величиной релаксации. В отличие от поверхностей (100) и (110), где различие рассчитанной и экспериментальной частот релеевской моды составляет 3–8%, в случае поверхности (111) наблюдается отличное согласие теории и эксперимента.

Таким образом, в модели погруженного атома проведены расчеты вибрационных мод на поверхностях с низкими индексами. Получено хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. Это позволяет надеяться на успешное описание вибрационных мод для поверхностей с высокими индексами и различных кластерных структур.

В заключение авторы выражают благодарность А.Г. Липницкому и А.В. Берчу за помощь в проведении расчетов.

Проведение данных исследований стало возможным благодаря выделенному Международным научным фондом и правительством России гранту № J3W100.

Список литературы

- [1] Chen Y., Tong S.Y., Kim J.S., Kesmodel L.L., Rodach T., Bohnen K.P., Ho K.M. Phys. Rev. **B44**, 11394 (1991).
- [2] Moretto P., Rossa M., Valbura V., Black J.E. Phys. Rev. **B41**, 12905 (1990).
- [3] Doak R.B., Harten V., Toennics J.P. Phys. Rev. Lett **51**, 578 (1983).
- [4] Chen Y., Tong S.Y., Bohnen K.P., Rodach T., Ho K.M. Phys. Rev. Lett. **70**, 603 (1993).
- [5] Zeppenfeld P., Kern K., David R., Kuhnke K., Comsa G. Phys. Rev. **B38**, 12329 (1988).
- [6] Baddorf A.P., Plummer E.W. Phys. Rev. Lett. **66**, 2770 (1991).

- [7] Bracco G., Tatarer R., Tommasini F., Linke V., Persson M. Phys. Rev. **B36**, 2928 (1987)
- [8] Nelson J.S., Sowa E.C., Daw M.S. Phys. Rev. Lett. **61**, 1977 (1988).
- [9] Nelson J.S., Daw M.S., Sowa E.C. Phys. Rev. **B40**, 1465 (1989).
- [10] Ditlevsen P.D., Norskov J.K. Surf. Sci. **254**, 261 (1991).
- [11] Rodach T., Bohnen K.P., Ho K.M. Surf. Sci. **296**, 123 (1993).
- [12] Bertsch A.V., Chulkov E.V., Ereemeev S.V., Lipnitskii A.G., Rusina G.G., Sklyadneva I.Yu. Vacuum **46**, 625 (1995).
- [13] Chen L., Kesmodel L.L. Surf. Sci. **320**, 105 (1994).
- [14] Lahee A.M., Toennics J.P., Woll Ch. Surf. Sci. **191**, 529 (1987).
- [15] Hsu C.H. PhD Thesis. Boston University Graduate School (1992).
- [16] Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Phys. Rev. **B33**, 7983 (1986).
- [17] Kohn W., Sham L.J. Phys. Rev. **A140**, 1133 (1965).
- [18] Hedin L., Lundqvist B.I. J. Phys. **C4**, 2062 (1971).
- [19] Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В. Поверхность, **6**, 23 (1994).
- [20] Берч А.В., Еремеев С.В., Липницкий А.Г., Складнева И.Ю., Чулков Е.В. ФТТ **36**, 2935 (1994).
- [21] Behm R.J., Christmann K., Ertl G., van Hove M.A., Thiel P.A., Weinberg W.H. Surf. Sci. **88**, L59 (1979)
- [22] Quinn J., Li Y.S., Tian D., Li H., Jona F., Marcus P.M. Phys. Rev. **B42**, 11348 (1990).
- [23] Diehl R.D., Lindroos M., Kearsley A., Barnes C.J., King D.A. J. Phys. **C18**, 4069 (1985).