

## Структура и стабильность кластеров на поверхностях металлов

© Н.А. Леванов\*, В.С. Степанюк\*\*, В. Хергерт\*\*, А.А. Кацнельсон\*, А.Э. Мороз\*, К. Кокко\*\*\*

\* Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119899 Москва, Россия

\*\* Университет Мартина Лютера, Халле-Виттенберг, D-06108 Халле, Германия

\*\*\* Университет Турку, FIN-20014 Турку, Финляндия

E-mail: albert@solst.phys.msu.su

(Поступила в Редакцию 19 мая 1998 г.)

В окончательной редакции 13 октября 1998 г.)

Полуэмпирическими методами с использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия исследуются малые кластеры 3d металлов-Ni/Ni(001), Cu/Cu(001), 4d-Pd/Pd(001), Ag/Ag(001), 5d-Pt/Pt(001), Au/Au(001). Показано, что для всех указанных металлов характерны одни и те же магические числа (4, 6 и 9), которые определяются особенностями симметрии кластеров, связанными с морфологией подложки ГЦК (001). На примере Pt/Pt(111) показано, что малые кластеры из 7 и 10 атомов наиболее устойчивы для поверхности ГЦК (111). Это подтверждает связь магических чисел с симметрией кластеров.

Современный уровень исследований в области сканирующей туннельной микроскопии (STM) позволяет выращивать самые разнообразные кластеры на металлических подложках [1,2]. Интенсивные работы в этой области в значительной степени связаны с тем фактом, что кластеры на подложках обладают уникальными магнитными свойствами [3–5] и могут быть в перспективе использованы для создания принципиально новых магнитных материалов. Устойчивость малых кластеров, возникающих на начальном этапе роста тонких пленок, позволяет оценивать, какой механизм роста реализуется на практике. Наблюдение острых пиков 2, 8, 20, 40 в массовом спектре кластеров Na [6] и прямая аналогия с магическими числами стабильных атомных ядер положили начало экспериментальным и теоретическим работам в области кластерной физики. При изучении свободных кластеров было показано, что спектр наиболее устойчивых конфигураций, называемых магическими, может быть связан, во-первых, с заполнением электронных оболочек [6], а во-вторых, с симметрией межатомных связей [7]. Например, если в случае Na наиболее устойчивые 3D кластеры содержали 2, 8, 20, ... атомов, то для свободных кластеров инертных газов и некоторых переходных металлов характерными оказались конфигурации типа икосаэдра, содержащие 13, 55, ... атомов. Уже первые работы по кластерам на подложках доказали [8], что спектр магических чисел отличен от случая свободных кластеров. При формировании структуры и свойств кластеров на подложке важную роль играет подложка [9]. Так, в работе [8] при исследовании кластеров Al/Al(001), Al/Al(111) было показано, что стабильные кластеры содержат соответственно 4, 6, 8, 10 и 4, 7, 10 атомов. Различным оказалось поведение Li/Li(111) и Al/Al(111). Для Al устойчивыми были конфигурации 4, 6, 9, что объяснялось наличием сильной s-p гибридизации у Al. Малые кластеры Li/Li(111) с четным числом атомов являются наиболее стабильными, эта тенденция пропадает при росте числа атомов в кластере. Так, кластер из 9 атомов оказывается устойчивее, чем десятиатомный. Таким образом, как и в случае

свободных кластеров, на устойчивость кластеров на подложках оказывают влияние как электронные свойства атомов, так и симметрия атомных связей, связанная с типом подложки. В работе [7] как "из первых принципов" (метод функции Грина), так и полуэмпирическими методами с многочастичными потенциалами исследовались кластеры Ag/Ag(001). Было показано, что в рамках обоих подходов магические кластеры содержат 4, 6 и 9 атомов. Авторы статьи [10] исследовали поведение Pt/Pt(001). Эксперимент с использованием полевой ионной микроскопии показывает, что цепочки из трех и пяти атомов Pt являются стабильными конфигурациями, тогда как соответствующие компактные острова метастабильны. Проведенные с помощью метода окруженного атома (EAM) вычисления объясняют устойчивость цепочек. Кластеры Ni/Ni(001) и Pt/Pt(001) рассчитывались в работе [11]. Было показано, что конфигурации трех-, пяти- и восьмиатомных кластеров для Ni и Pt различны. В случае Pt реализуются линейные цепочки, тогда как для Ni стабильнее компактные острова.

Малые кластеры на подложках соответствуют началу процесса роста тонких пленок. В экспериментах Дж. Комса [12] по рассеянию молекулярных пучков He на поверхности Pt(111) было показано, что интенсивность рассеяния при напылении атомов Pt меняется в зависимости от температуры. Для того чтобы объяснить этот результат, авторы рассматривали энергию связи кластеров в терминах числа связей. Если напыление атомов ведется при низкой температуре и вероятность разрыва одновременно двух связей между атомами кластера мала, то реализуются условия для роста кластеров большего размера. Однако, если температура увеличивается до 600 К, то две связи могут быть легко разорваны, тогда как вероятность одновременного разрыва трех связей остается малой. В этом случае наименьший устойчивый кластер Pt/Pt(111) содержит 7 атомов, так как для того чтобы оторвать от компактного гептамера один атом, нужно разорвать три связи. Следующая стабильная конфигурация получается добавлением трех атомов и представляет собой компактный декамер. Эта же система

исследовалась экспериментально в работе [13]. Было обнаружено, что при температуре 20 К адатомы могут располагаться как в ГЦК, так и в ГПУ положениях. Адатомы в положениях ГПУ связаны слабее и при температуре порядка 45 К переходят в ГЦК положения.

В настоящей работе для систематического исследования кластеров Cu/Cu(001), Ni/Ni(001), Pd/Pd(001), Ag/Ag(001), Pt/Pt(001), Au/Au(001) используются метод окруженного атома (EAM) и потенциал Россато–Жиллоп–Легранд, полученный в рамках модели сильной связи. Энергии связи атомов в кластерах и ее вторая производная вычисляются с учетом релаксации при нулевой температуре. Анализируются причины устойчивости линейных цепочек в случае Pt и Au. Для оценки влияния ориентации подложки на устойчивость кластеров рассматривается система Pt/Pt(111).

В разделе 1 приводятся краткие сведения по используемым многочастичным потенциалам, методика расчетов излагается в разделе 2. Результаты обсуждаются в разделе 3.

## 1. Теория

1.1. Многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия. Когезионная энергия записывается в виде [14–19]

$$E_{coh} = E_{rep} + E_{bond}. \quad (1)$$

Энергия отталкивания  $E_{rep}$  представляется суммой парных потенциалов отталкивания, а энергия связи выражается через полную плотность состояний  $D(E)$

$$E_{bond} = 2 \sum_i \int_{\varepsilon_i}^{E_F} (E - \varepsilon_i) d_i(E) dE. \quad (2)$$

В приближении второго момента энергия связи пропорциональна корню из второго момента

$$E_{bond}^{(i)} = \text{const}(\mu_i^{(2)})^{1/2}. \quad (3)$$

Поскольку  $\mu_i^{(2)}$  есть сумма интегралов перекрытия между атомом  $i$  и его соседями, энергия связи на атом может быть представлена как квадратный корень из суммы парных взаимодействий между атомом  $i$  и его ближайшими соседями.

1.2. Многочастичный потенциал Россато–Жиллоп–Легранд (RGL). В ТВ-модели вклад пары атомов в энергию связи зависит от расстояния между атомами и характера соседей. Поэтому в случае RGL-потенциала [17–18] энергия связи имеет многочастичный характер и представляется следующим выражением:

$$E'_{bond} = - \left\{ \sum_{j \neq i} \xi_{\alpha\beta}^2 e^{-2q_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta} - 1)} \right\}^{1/2}, \quad (4)$$

где  $r_{ij}$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ,  $r_0^{\alpha\beta}$  — расстояние между ближайшими соседями в  $\alpha\beta$ -решетке,  $\xi$  — эффективный обменный интеграл перекрытия,  $q$

определяет его зависимость от расстояния. Для обеспечения стабильности системы к энергии связи добавляется парное Борн–Майеровское отталкивание

$$E_{rep}^i = \sum_j A_{\alpha\beta} e^{-p_{\alpha\beta}(r_{ij}-1)}. \quad (5)$$

Это слагаемое отвечает электростатическому отталкиванию. Полная когезионная энергия

$$E_{coh} = \sum_i (E_{rep}^i + E_{bond}^i). \quad (6)$$

Свободные параметры  $A, \xi, p, q, r_0$  подгоняются под экспериментальные значения когезионной энергии, постоянной решетки и значения упругих модулей при нулевой температуре. Суммирование в (4), (5) ведется до пятых соседей в кубической структуре и до девятих соседей в гексагональной структуре.

1.3. Метод окруженного атома (EAM). В рамках EAM [19,20] отрицательный вклад в когезионную энергию равен

$$\sum_i F_i(\rho_{h,i}), \quad \rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^q(R_{ij}),$$

где  $F_i$  — функция погружения,  $\rho_{h,i}$  имеет смысл суммарной электронной плотности, которая создается атомным окружением в точке нахождения атома  $i$ . Отталкивание записывается в форме суммы парных потенциалов

$$\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}), \quad \phi_{ij} = Z_i(R)Z_j(R)/R,$$

$$Z(R) = Z_0(1 + \beta R^v)e^{-\alpha R}. \quad (7)$$

Общая форма записи энергии связи в RGL- и в EAM-потенциалах имеет вид  $A \sum_i F(\rho_i)$ . Если в случае

RGL  $\rho_i$  имеет смысл ширины функции плотности состояний, то в случае EAM  $\rho_i$  — суммарная электронная плотность в точке нахождения  $i$ -го атома. Электронная плотность рассчитывается с использованием результатов Клементи–Роэрти [21] для электронных плотностей свободных атомов в рамках теории Хартри–Фока. Когезионная энергия

$$E_{coh} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}). \quad (8)$$

При подгонке [19] использовались следующие данные: энергия сублимации, постоянная решетки, упругие модули, энергия формирования вакансии, а также энергия ОЦК-фазы.

## 2. Методика

Поверхность исследуемых металлов моделировалась с помощью расчетной ячейки, состоящей из восьми атомных слоев, в каждом слое содержится 128 атомов. В двух направлениях, перпендикулярных вертикальной оси, на систему накладываются периодические граничные условия, два нижних слоя являются статическими.

Интегрирование уравнений движения ведется с использованием leap–frog алгоритма [22] с временным шагом  $10^{-15}$  с. Для охлаждения системы используется следующая процедура: в процессе моделирования скорости частиц, направленные против сил, действующих со стороны окружающих атомов, зануляются. Такая процедура охлаждения обычно существенно быстрее, чем обычное масштабирование скоростей. Для поиска глобального минимума потенциальной энергии системы используется метод наискорейшего спуска [23]. Система нагревается до температуры выше точки плавления, после чего с определенным интервалом записываются, например, 100 конфигураций системы в нагретом состоянии. Затем все записанные конфигурации охлаждаются. Таким образом, система имеет возможность выпадать в разные минимумы, среди которых мы выбираем самый низкий. Такой подход является оптимальным, хотя и не может, вообще говоря, гарантировать нахождение глобального минимума [24–26].

В начале процесса моделирования атомы находятся в узлах идеальной ГЦК-решетки. Характеристикой стабильности кластера из  $n$  атомов на подложке служит энергия связи и ее вторая производная [7]

$$E_{bind}^n = \frac{(E_{cluster} - E_{sub}) - n(E_1 - E_{sub})}{n}, \quad (9)$$

$$E_{diff}^n = 2E_{bind}^n - E_{bind}^{n+1} - E_{bind}^{n-1}. \quad (10)$$

В формуле (9)  $E_{cluster}$  — энергия системы с кластером на подложке,  $E_1$  — энергия системы с одним атомом,  $E_{sub}$  — энергия подложки, все энергии относятся к отрелаксированным конфигурациям. Стабильными являются кластеры, энергия которых минимальна.

### 3. Результаты и их обсуждение

Стабильные конфигурации  $3d$ ,  $4d$ ,  $5d$  металлов, рассчитанные с RGL-потенциалом, представлены на рис. 1. Для  $3d$  металлов Ni и Cu компактные острова (их форма представлена на рис. 1, *a*) являются более энергетически устойчивыми. С ростом числа атомов в кластере энергия связи на один атом (рис. 1, *b*) растет (при обсуждении результатов удобно под энергией связи понимать ее абсолютную величину, в этом случае необходимо минимумы поменять местами с максимумами). Наиболее устойчивые конфигурации кластеров определяются по максимумам второй производной энергии связи и соответствуют компактным структурам из 4, 6 и 9 атомов. Вид этих кривых практически одинаков для всех 6 металлов, поэтому ограничимся иллюстрацией этих кривых на примере Pt и Au (рис. 1, *g*). Устойчивый кластер из 8 атомов получается из девятиатомного ( $3 \times 4$ ) кластера удалением одного углового атома. Для Pd и Ag (рис. 1, *c*) наблюдаются те же магические конфигурации, но конфигурация семиатомного кластера отличается от случая  $3d$  металлов. Кроме того, если для Ag конфигурация восьмиатомного кластера такая же, как для Ni и

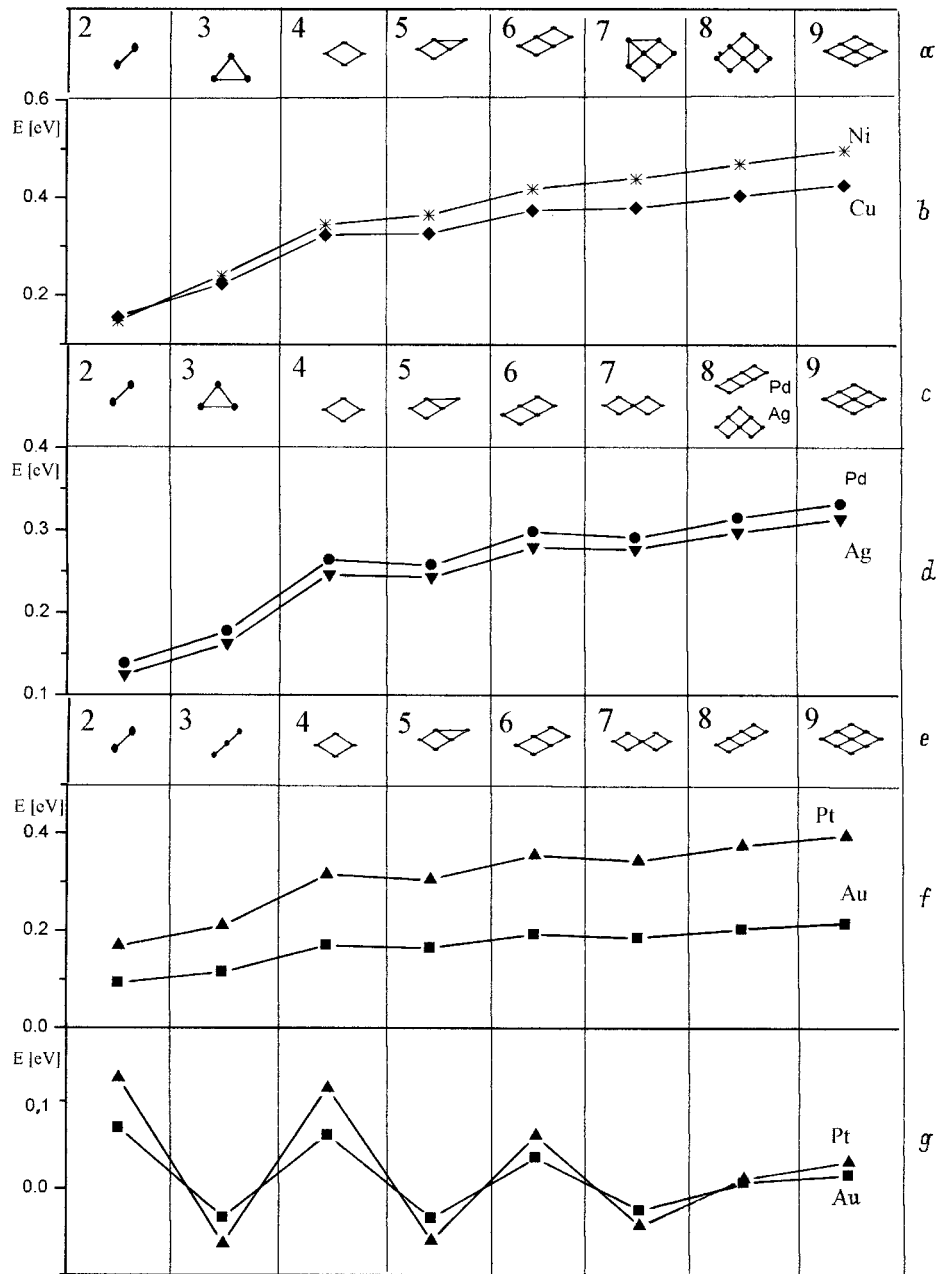
Cu, то для Pd устойчивой оказывается структура  $4 \times 2$ , которая отличается от предыдущей меньшим числом вторых соседей (6 вместо 7). Зависимость энергии кластеров Pd и Ag от размера дана на рис. 1, *d*.

Рассмотрим далее стабильные конфигурации  $5d$  металлов. Их вид дан на рис. 1, *e*, энергия стабильных кластеров на рис. 1, *f*, а вторая производная — на рис. 1, *g*. Магические числа по-прежнему в большей степени определяются геометрией подложки и соответствуют плотно упакованным компактным островам (4, 6, 9). Для кластеров из трех атомов линейная цепочка в случае Pt и Au оказывается стабильнее, чем компактный остров. Устойчивые семиатомный и восьмиатомный кластеры такие же, как в случае Pd. Однако компактный остров из 5 атомов для Pt оказывается стабильнее, чем линейная цепь, что противоречит [10], где показано, что линейные цепочки из 3 и 5 атомов стабильнее соответствующих островов. Это несоответствие, по-видимому, связано с тем, что подгонка потенциала межчастичного взаимодействия под объемные свойства не учитывает в полной мере свойств поверхности и наноструктур.

Энергии связи димеров в положении первых, вторых и третьих соседей на поверхности, рассчитанные с RGL-потенциалом, представлены в табл. 1. Приведенные данные, безусловно, характеризуют зависимость энергии связи димера от расстояния между атомами, хотя, строго говоря, энергия связи пары атомов в кластере может отличаться от энергии связи димера. Вклад вторых соседей в энергию максимален в случае Ni. Это связано с тем, что среди рассматриваемых металлов только для Ni  $d$ -оболочка является незаполненной, и как следствие,  $d-d$  взаимодействие для Ni оказывается сильнее. Если для Ni, Cu и Ag энергия связи вторых соседей отрицательна, т.е. вторые соседи притягиваются, то для Pd, Pt и Au энергия связи двух атомов в положениях вторых соседей положительна, атомы отталкиваются. Окружение атомов в кластерах цепочечного и островного типов отличается количеством вторых и последующих соседей. Так, атомы трехатомных цепочек имеют только первых и третьих соседей, а трехатомных островов — соответственно только первых и вторых. Поэтому трехатомные цепочки Pt и Au оказываются стабильнее трехатомных островов. На этой основе можно рассмотреть и проблемы стабильности иных кластеров. Например, устойчивые кластеры из 8 атомов Ni, Cu и Ag должны отличаться от восьмиатомных кластеров Pd, Pt, Au (табл. 2).

**Таблица 1.** Энергия связи для первых, вторых и третьих соседей (eV/atom)

Атом	I	II	III
Cu	−0.16	−0.02	0.01
Ni	−0.15	−0.07	−0.02
Ag	−0.12	−0.01	0.001
Pd	−0.14	0.005	0.002
Pt	−0.17	0.02	0.003
Au	−0.09	0.01	0.004













**Рис. 1.** Форма стабильных ультрамалых кластеров на подложках (001), их энергия связи (в eV/atom) и ее вторая производная в зависимости от размера кластеров для ряда переходных металлов: *a* — форма стабильных кластеров для Cu и Ni; *b* — энергия стабильных кластеров для тех же металлов; *c* — форма стабильных кластеров для Ag и Pd; *d* — энергия стабильных кластеров для тех же металлов; *e* — форма стабильных кластеров для Au и Pt; *f* — энергия стабильных кластеров для тех же металлов; *g* — вторая производная от энергии связи для Au и Pt.

Результаты моделирования Pt/Pt(001) с RGL- и с EAM-потенциалами показывают, что энергия связи линейных цепочек для обоих методов практически одна и та же, но энергия компактных островов в случае EAM существенно меньше. Это связано с тем, что энергия взаимодействия первых соседей для RGL и EAM практически одна и та же, а положительная энергия, соответствующая отталкиванию вторых соседей, больше в случае EAM. За счет того, что положительный вклад вторых соседей в

энергию больше в случае EAM, линейные цепочки из 3 и 5 атомов оказываются устойчивее, чем соответствующие компактные острова.

Таким образом, для металлов с длинными хвостами электронной плотности энергия связи вторых соседей может быть положительна. Поэтому для малых кластеров наиболее устойчивыми могут быть линейные структуры кластеров на подложках. Магические числа для всех шести металлов определяются структурой под-

**Таблица 2.** Абсолютные значения энергии связи для различных конфигураций с одинаковым числом атомов (RGL-потенциал, eV/atom)

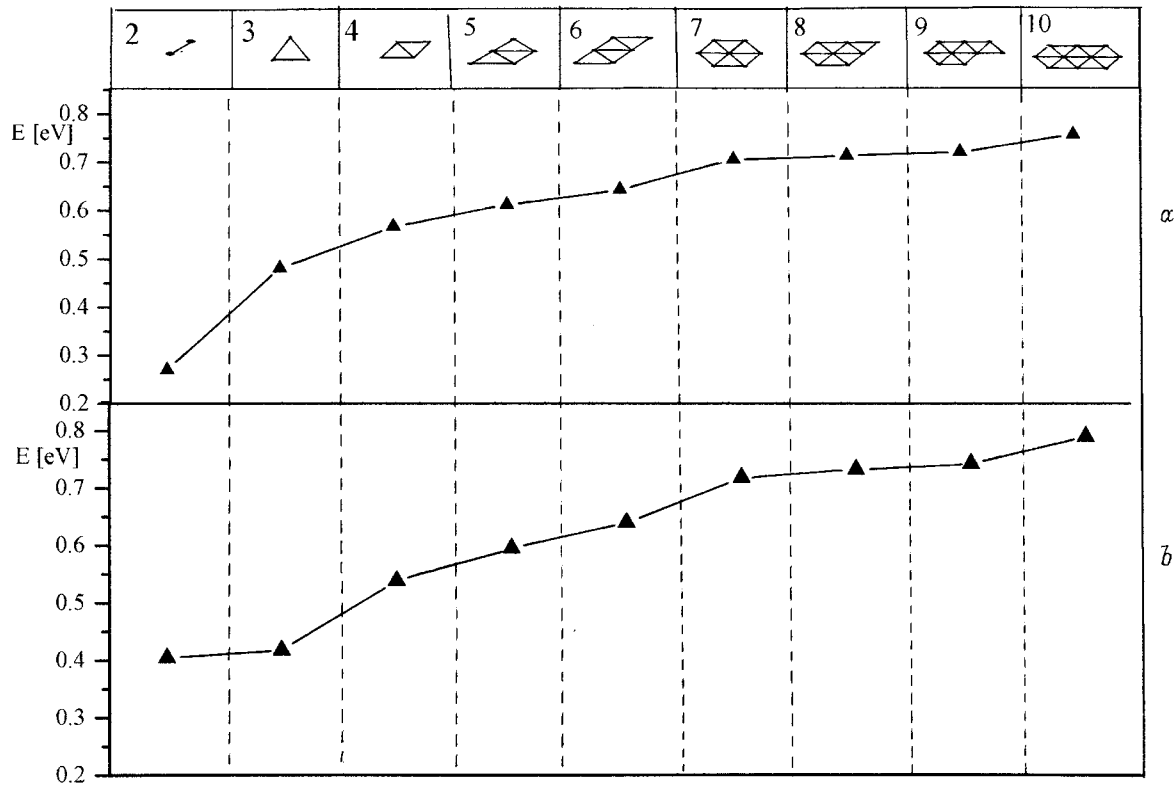
									
Ni 0.2404	0.2028	0.3646	0.246	0.4396	0.4356	0.4195	0.4253	0.454	0.4706
Cu 0.2234	0.211	0.3271	0.2445	0.3806	0.3777	0.3736	0.3733	0.3936	0.4053
Pd 0.1775	0.174	0.2574	0.2023	0.2868	0.2906	0.2883	0.2887	0.3148	0.3137
Ag 0.1676	0.1597	0.2431	0.1861	0.2742	0.2766	0.2736	0.2728	0.2965	0.2974
Pt 0.2093	0.2103	0.3054	0.2435	0.3383	0.3441	0.3422	0.3431	0.3752	0.3727
Au 0.1117	0.1146	0.1646	0.1325	0.182	0.1827	0.185	0.1856	0.2035	0.2018

ложки и соответствуют компактным структурам из 4, 6 и 9 атомов. Из табл. 1 видно, что энергия связи между атомами велика для ближайших соседей и уменьшается, осциллируя с ростом расстояния между рассматриваемыми атомами. Поэтому, если количество атомов в системе больше 4–5, то ближайшие соседи одних атомов оказываются не ближайшими для других. В результате вклад в энергию от взаимодействия между далекими соседями оказывается очень малым и преобладающим является взаимодействие между ближайшими соседями, умноженный на количество таких соседей. Относительное число внутренних атомов кластера оказывается более высоким у кластеров, имеющих компактную симметричную форму, которые поэтому и являются наиболее устойчивыми. Для рассматриваемых в данной работе весьма малых кластеров непосредственное применение этого правила невозможно, однако оно может быть преобразовано в другое: энергия системы по абсолютной величине тем выше, чем больше в ней количество ближайших соседей. Легко понять, что это количество выше для компактных симметричных кластеров (при одинаковом числе атомов в системе).

В заключение приведем результаты моделирования гомогенных кластеров Pt на плотноупакованной поверхности Pt/Pt(111), которые сравниваются с экспериментом [12]. Стабильные структуры кластеров до десяти атомов, рассчитанные с RGL- и EAM-потенциалами, приведены на рис. 2. В отличие от поверхности ГЦК (001) в кластерах нет атомов, находящихся на расстоянии  $a$  друг от друга. Вторые соседи на поверхности ГЦК (111) находятся на расстоянии  $a\sqrt{3}/2$  и соответствуют третьей координационной сфере в объеме. Такие соседи появляются в кластерах начиная с четырехатомных. Их вклад в энергию связи будет значительно меньше, чем для поверхности ГЦК (001). Поэтому стабильность малых кластеров связана с максимальным числом связей на атом в согласии с приведенным выше правилом.

Для двух использованных потенциалов кластеры из 7 и 10 атомов являются магическими. Для этих кластеров число связей на один атом максимально. В случае RGL энергия связи димера получается значительно меньше, чем в случае EAM (0.27 и 0.40 eV). Поэтому в случае RGL-потенциала тримеру соответствует максимум второй производной (10). Для EAM энергия связи на атом кластера для димера практически равна энергии тримера соответственно 0.40 и 0.42 eV. В результате максимум второй производной приходится на четырехатомный кластер и магические числа для Pt/Pt(111) равны 4, 7 и 10. Указанная разница в энергиях связи вызвана тем, что релаксация поверхности при использовании RGL- и EAM-потенциалов существенно различна [17,20]. Например, для Pt/Pt(001) релаксация первого слоя  $\Delta z_{12}$  с RGL- и EAM-потенциалами составляет соответственно  $-4.1$  и  $-6.9\%$ , а в случае Ag релаксация второго слоя  $\Delta z_{23}$  для RGL и EAM очень мала, но отличается знаком ( $+0.6$  и  $-0.05\%$ ). В соответствии с [13] энергия связи одних и тех же кластеров в ГЦК и ГПУ положениях в наших расчетах практически одинаковы. Это связано с тем, что определяющее влияние на энергию связи атомов в кластере оказывает верхний слой подложки.

Таким образом, топология поверхности ГЦК (001) определяет одинаковые магические числа для всех шести исследованных металлов (4, 6 и 9). Очевидна связь магических чисел с симметрией кластеров, обеспечивающей наименьший вклад граничных атомов. Однако при увеличении хвостов электронной плотности растет вклад вторых и последующих соседей. Поэтому при переходе от  $3d$ - к  $4d$ - и  $5d$ -металлам с увеличением хвостов электронной плотности изменяются и стабильные конфигурации кластеров на подложках. Для Pt и Au становятся устойчивыми и некоторые линейные кластеры. Связь магических чисел с симметрией кластеров подтверждается и для поверхности ГЦК (111). В этом случае становятся энергетически стабильными симметричные кластеры из



**Рис. 2.** Энергия связи, рассчитанная для стабильных кластеров Pt на подложке Pt(111) с помощью: RGL-метода (а), EAM-метода (б). В верхней строке указано количество атомов в кластере и показана их форма.

7 и 10 атомов. Поскольку подгонка параметров RGL и EAM ведется под объемные характеристики, релаксация для разных потенциалов является различной. Поэтому для правильного описания энергетики наноструктур необходимо учитывать при определении параметров потенциала не только объемные, но и поверхностные свойства. Работа в этом направлении ведется в нашей группе. Одним из возможных способов является использование расчетов "из первых принципов" (метод Корринга-Кона-Ростокера) для кластеров на поверхностях [3].

Работа поддержана фондом INTAS (грант 96-0606).

## Список литературы

- [1] M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. *Science* **262**, 218 (1993).
- [2] G. Meyer, B. Neu, K.-H. Rieder. *J. Appl. Phys.* **A60**, 345 (1995).
- [3] K. Wildberger, V.S. Stepanyuk, P. Lang, R. Zeller, P.H. Dederichs. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2551 (1995).
- [4] V.S. Stepanyuk, W. Hergert, K. Wildberger, R. Zeller, P.H. Dederichs. *Phys. Rev.* **B53**, 2121 (1996).
- [5] V.S. Stepanyuk, W. Hergert, P. Rennert, K. Wildberger, R. Zeller, P.H. Dederichs. *Phys. Rev.* **B54**, 14 121 (1996).
- [6] W.D. Knight, K. Clemenger, W.A. de Heer, W.A. Saunders, M.Y. Chou, M.L. Cohen. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2141 (1984).
- [7] S.K. Nayak, P. Jena, V.S. Stepanyuk, W. Hergert, K. Wildberger. *Phys. Rev.* **B56**, 6952 (1997).
- [8] H. Hakkinen, M. Manninen. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1599 (1996).
- [9] A.K. Ray, B.K. Rao, P. Jena. *Phys. Rev.* **B48**, 14 702 (1993).
- [10] P.R. Schwoebel, S.M. Foiles, C.L. Bisson, G.L. Kellogg. *Phys. Rev.* **B40**, 10639 (1989).
- [11] C. Liu, J. Adams. *Surface Science* **268**, 73 (1992).
- [12] G. Rosenfeld, A.F. Becker, B. Poelsema, L.X. Verheij, George Comsa. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 917 (1992).
- [13] A. Golzhauser, G. Ehrlich. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 133 (1996).
- [14] A.P. Sutton, J. Chen. *Phil. Mag. Lett.* **61**, 139 (1990).
- [15] S.P. Chen, A.F. Voter, D.J. Srolovith. *J. Mater. Res.* **4**, 62 (1989).
- [16] A.P. Sutton, M.W. Finnis, D.G. Pettifor, Y. Ohta. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, 35 (1988).
- [17] M.W. Finnis, J.E. Sinclair. *Phil. Mag.* **A50**, 45 (1984).
- [18] F. Rafii-Tabar, A.P. Sutton. *Phil. Mag. Lett.* **63**, 217 (1991).
- [19] V. Rossato, M. Guillope, B. Legrand. *Phil. Mag.* **A59**, 321 (1989).
- [20] F. Cleri, V. Rossato. *Phys. Rev.* **B48**, 22 (1993).
- [21] M.S. Daw, M.I. Baskes. *Phys. Rev.* **B29**, 6443 (1984).
- [22] S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw. *Phys. Rev.* **B33**, 7983 (1986).
- [23] E. Clementi, C. Roetti. *At. Data Nucl. Data Tables* **14**, 177 (1974).
- [24] R.W. Hockni, I.W. Istwood. *Computer simulation using particles*. McGraw-Hill, N.Y. (1981). 540 p.
- [25] F. Stillinger, T. Weber. *Phys. Rev.* **A25**, 978 (1982).
- [26] S.K. Nayak, B. Reddy, B.K. Rao, S.N. Khanna, P. Jena. *Chem. Phys. Lett.* **253**, 390 (1996).