

Диффузионные и вибрационные свойства поверхностных сплавов Cu(001)–*c*(2×2)–Pd

© С.В. Еремеев*, Г.Г. Русина*, И.Ю. Скляднева***, С.Д. Борисова*, Е.В. Чулков**,**

* Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, 634021 Томск, Россия

** Donostia International Physics Center (DIPC), 20018 San Sebastián/Donostia, Spain

*** Depto. de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea, Apdo.1072, 20018 San Sebastián/Donostia, Spain

E-mail: waaerers@mail.ru

(Поступило в Редакцию 20 мая 2004 г.)

С помощью межатомных потенциалов взаимодействия, построенных в рамках метода погруженного атома, исследованы структурные, диффузионные и вибрационные свойства поверхностного и подповерхностного упорядоченных сплавов Cu(001)–*c*(2×2)–Pd. Сравнение данных, полученных для таких равновесных структур сплавов, с экспериментальными данными и результатами других расчетов показывает хорошее согласие. Рассчитанные диффузионные характеристики не противоречат экспериментально наблюдаемой кинетике и эволюции поверхностных сплавов и подтверждают стабильность подповерхностного сплава. Энергия активации планарной диффузии палладия на начальном этапе формирования сплава согласуется со значением, измеренным с помощью сканирующей туннельной микроскопии (STM). Рассчитанные поверхностные фононные частоты хорошо воспроизводят экспериментальные значения, полученные при использовании спектроскопии характеристических потерь энергии электронов (EELS). Результаты показывают сильную связь Cu–Pd наряду с ослаблением связи между поверхностными атомами меди.

Работа выполнена при поддержке Министерства промышленности, науки и технологий Российской Федерации (грант № 40-012.1.1.1153) и NATO Science Programme (грант PST.CLG.980395).

1. Введение

В последнее время наблюдается неугасающий интерес к процессам образования поверхностных сплавов, формирующихся на начальных стадиях эпитаксиального роста [1]. Одной из наиболее интенсивно изучаемых систем является Pd/Cu(001), поскольку она характеризуется высокой каталитической активностью поверхности [2–15]. Экспериментальное изучение структуры Pd/Cu(001) с помощью дифракции медленных электронов показало, что осаждаемые при комнатной температуре атомы палладия инкорпорируются в поверхностный слой меди, при покрытии 0.5 монослоя формируется упорядоченный поверхностный сплав Cu(001)–*c*(2×2)–Pd [3,5]. Экспериментальное подтверждение образования поверхностного сплава в данной системе было получено также при использовании фотоэмиссии [3], дифракции медленных электронов [6] и резерфордской спектроскопии обратного рассеяния [4]. Предпочтительность поверхностного сплава по сравнению с упорядоченным *c*(2×2) покрытием также установлена в ряде расчетных работ при использовании *ab initio* [7] и полуэмпирических [6,8] методов. Для выяснения кинетики формирования поверхностного сплава в [16] с помощью сканирующей туннельной микроскопии изучались диффузионные механизмы формирования упорядоченного сплава. Были проанализированы два предполагаемых механизма: 1) образование медного адатома и миграция инкорпорированного Pd во вновь образованную вакансию меди (как в случае монослоя Cu/Co на Ru(001) [17]);

2) латеральная диффузия атомов Pd по поверхностным вакансиям (как в случае Mn и In на Cu(001) [18,19]). Установлено, что в данной системе реализуется именно второй механизм. Данный вывод был также подтвержден расчетами на основе метода Монте-Карло [16]. Наряду с этим в ряде работ было установлено, что палладий диффундирует в подповерхностный слой и стремится образовать там *c*(2×2) упорядоченный сплав [5,13,20]. Например, в [20] при использовании дифракции медленных электронов была определена энергия миграции палладия во второй слой. Для изучения стабильности поверхностного сплава Cu(001)–*c*(2×2)–Pd в [21] с помощью спектроскопии характеристических потерь энергии электронов были измерены поверхностные вибрационные моды вдоль направления $\overline{\Gamma X}$. Обнаружено, что при комнатной температуре существует только одно поверхностное состояние в точке \overline{X} , которое было идентифицировано как смешанное состояние меди и палладия, однако при отжиге появляется высокочастотный пик, который становится доминирующим. Это состояние интерпретировалось как мода вертикальных колебаний в поверхностных островках меди. Помимо экспериментального определения вибрационных частот в этой же работе был проведен расчет фононного спектра в направлении $\overline{\Gamma X}$ в рамках теории эффективной среды. В работе [22] в рамках метода погруженного атома с использованием потенциала для сплава в форме [23] был проведен расчет вдоль всех симметричных направлений двумерной зоны Бриллюэна (ЗБ). Расчеты показали наличие в точке \overline{X} (помимо смешанного состояния) со-

стояний, локализованных на адатомах и поверхностных атомах подложки.

Однако необходимо отметить, что исследования поверхностной диффузии и стабильности данной системы ориентированы на решение частных задач, хотя для полного понимания и описания данных вопросов бесспорным является использование взаимодополняющих исследований. В настоящей работе мы провели расчеты атомной структуры поверхностного и подповерхностного сплавов, диффузионных характеристик системы на всех стадиях формирования сплава — от начального осаждения палладия до формирования подповерхностной структуры, а также для подтверждения адекватности используемых в диффузионных расчетах потенциалов провели расчет вибрационных свойств поверхностного и подповерхностного сплавов $\text{Cu}(001)\text{-}c(2\times 2)\text{-Pd}$, где была полностью учтена симметрия кристалла.

2. Метод расчета

В настоящей работе использовался метод погруженного атома (МПА), предложенный в работе [23]. В МПА потенциальная энергия имеет вид

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

В этом выражении первое слагаемое представляет собой парный потенциал взаимодействия атомов, где r_{ij} — расстояние между атомами i и j . Второе слагаемое описывает многочастичные эффекты. Функция погружения F_i задана в узле r_i и определяется электронной зарядовой плотностью, которая представляется в виде суперпозиции электронных плотностей всех остальных атомов, расположенных в узлах r_j ; величины ρ_j^a получаются при решении задачи для свободного атома в приближении функционала локальной плотности. Используемые в данной работе потенциалы учитывают взаимодействия атомов до пятой координационной сферы. Параметры метода подгонялись под экспериментальные данные по равновесному объему, энергии образования вакансии, модулю всестороннего сжатия и модулю упругости для чистых палладия и меди. Парный потенциал имеет вид экранированного кулоновского потенциала и для описания взаимодействия атомов разных элементов выбирается в форме [24]

$$\varphi_{AB}(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{\rho_B(r)}{\rho_A(r)} \varphi_A(r) + \frac{\rho_A(r)}{\rho_B(r)} \varphi_B(r) \right], \quad (2)$$

где φ_A и φ_B — парные потенциалы меди и палладия. Используемые в работе потенциалы достаточно хорошо описывают как диффузионные, так и вибрационные свойства поверхности.

Равновесная геометрия поверхности находилась методом молекулярной динамики. Энергия образования вакансий E_f определялась в виде

$$E_f = E_{N-1} - E_N - E_1, \quad (3)$$

где E_N , E_{N-1} и E_1 — энергия системы без вакансии, энергия системы с вакансией и энергия, приходящаяся

на один атом в объеме. Энергия миграции E_m находилась как

$$E_m = E_{sp} - E_0, \quad (4)$$

где E_{sp} и E_0 — соответственно энергии системы с мигрирующим атомом в седловой и начальной точках миграционного пути. Энергия активации диффузии Q определяется суммой энергий образования и миграции. Расчет колебательных спектров вдоль симметричных направлений двумерной 3Б проводился для релаксированной 31-слойной пленки $\text{Cu}(001)\text{-}c(2\times 2)\text{-Pd}$ с атомами палладия как в поверхностном, так и в подповерхностном слое.

3. Атомная структура

Для получения равновесной структуры мы провели расчет релаксации поверхности с использованием метода молекулярной динамики. При релаксации поверхности $\text{Cu}(001)$ изменение межплоскостных расстояний между первым и вторым слоем d_{12} составляет -0.027 \AA (минус означает сокращение межплоскостных расстояний по сравнению с идеальной структурой), между вторым и третьим слоями $d_{23} = -0.005 \text{ \AA}$, а в более глубоких слоях расстояния соответствуют объемному

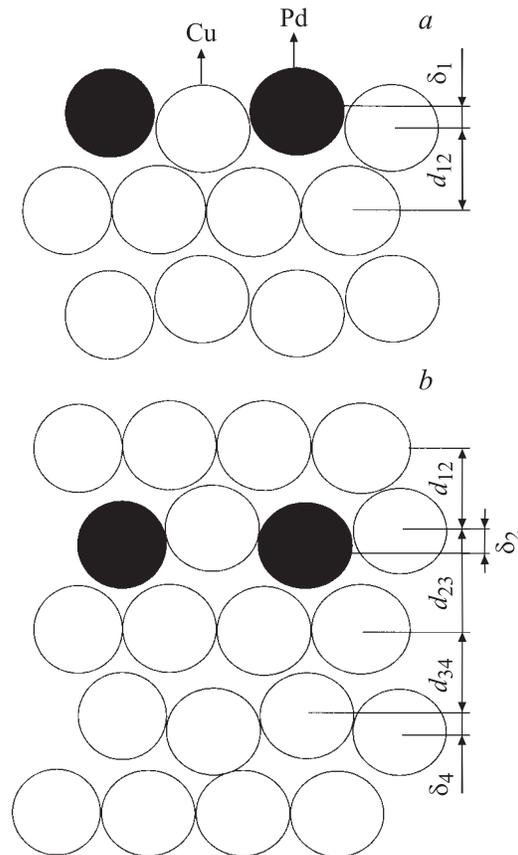


Рис. 1. Атомная структура поверхностного (а) и подповерхностного (б) сплава $\text{Cu}(001)\text{-}c(2\times 2)\text{-Pd}$.

значению, что хорошо согласуется с известными экспериментальными данными [6]. Равновесная структура поверхностного сплава Cu(001)-c(2x2)-Pd представлена на рис. 1, а. В результате релаксации поверхностные атомы меди, как и в случае чистой поверхности, смещаются в глубь объема, тогда как атомы палладия при этом смещаются в противоположном направлении. Изменение межплоскостных расстояний между атомами меди первого и второго атомных слоев d_{12} составляет -0.05 \AA . Кроме того, между атомами Cu и Pd в первом слое образуется расщепление δ_1 , равное 0.09 \AA . Результаты расчета согласуются с экспериментально наблюдаемой структурой поверхностного сплава. Так, определенные с помощью дифракции медленных электронов величины смещений атомов палладия относительно медного субстрата составляют $0.02-0.03 \text{ \AA}$ при межплоскостном расстоянии Cu₁₂, близком к объемному значению [3]. С другой стороны, из экспериментов по рассеянию среднеэнергетических ионов δ_1 между атомами Pd и Cu в первом слое они были оценены как $0.04-0.08 \text{ \AA}$ [6]. Полученные в рамках МПА в этой же работе релаксация $d_{12} = -0.05 \text{ \AA}$ и расщепление $\delta_1 = 0.12 \text{ \AA}$ практически совпадают с нашими значениями (отметим, что найденная нами величина δ_1 ближе к экспериментальным результатам).

Более сложная геометрия наблюдается для структуры подповерхностного сплава (рис. 1, b). В нашем расчете получены следующие значения для релаксационных изменений межплоскостных расстояний: $d_{12} = 0.022 \text{ \AA}$, $d_{23} = 0.035 \text{ \AA}$, $d_{34} = -0.022 \text{ \AA}$. Величины расщеплений во втором и четвертом слоях составляют $\delta_2 = 0.02 \text{ \AA}$, $\delta_4 = 0.001 \text{ \AA}$. Эти результаты достаточно хорошо согласуются со структурными данными, полученными с помощью дифракции медленных электронов [20].

4. Энергии активации диффузии

В качестве модели начальной стадии формирования двумерного упорядоченного поверхностного сплава Cu(001)-c(2x2)-Pd мы рассмотрели диффузию одиночного атома палладия на поверхности Cu(001). Прежде всего мы рассчитали энергию миграции атома по поверхности Cu(001), которая составила 0.62 eV , что сравнимо с энергией миграции Pd на поверхности Pd(001) (0.63 eV) [25]. В данной работе остановимся на вакансионном механизме диффузии, поскольку он является предпочтительным в изучаемой системе [16]. Полученное значение энергии образования поверхностной вакансии на Cu(001) 0.58 eV хорошо согласуется с экспериментальным значением (0.59 eV) [26]. Расчет показал, что процесс миграции адсорбированного Pd в поверхностную вакансию меди является безактивационным ($E_m < 0$), что и наблюдается экспериментально [16].

Далее мы рассмотрели процесс миграции инкорпорированного палладия в ближайшую поверхностную вакансию меди. Как видно из таблицы, полученная энергия миграции E_m^{11} хорошо согласуется с расчетным *ab*

Энергии образования вакансий меди E_f , энергии миграции атомов палладия E_m и энергии активации диффузии Q для одиночного палладия на Cu(001) и для поверхностного (Pd:1) и подповерхностного (Pd:2) сплавов Cu(001)-c(2x2)-Pd (верхние индексы обозначают номера атомных слоев, I и II — различные механизмы образования поверхностной вакансии)

Одиночный Pd/Cu(001)					
E_f^1	E_m^{11}	Q^{11}	E_f^2	E_m^{12}	Q^{12}
0.61	0.50	1.11	1.42	0.085	1.50
0.474*	0.466*	0.94*			
		0.88*			
		(эксп.)			
Cu(001)-c(2x2)-Pd:1					
E_f^1	E_m^{11}	Q^{11}	E_f^2	E_m^{12}	Q^{12}
0.69	0.64	1.33	1.50	0.36	1.86
					1.13**
					(эксп.)
Cu(001)-c(2x2)-Pd:2					
E_f^1	E_m^{21}	Q^{21}	$E_f^1(I)$	$E_f^1(II)$	$Q_{I,II}^{21}$
0.66	1.39	2.05	2.67	1.22	(I) 4.06
					(II) 2.61
E_f^2	E_m^{22}	Q^{22}	E_f^3	E_m^{23}	Q^{23}
1.46	1.01	2.47	1.38	1.07	2.45

*Данные [16].

**Данные [20].

initio значением, полученным при использовании VASP кода [16]. При этом энергия образования вакансии меди в ближайшем к атому палладия узле в нашем случае несколько превышает значение для чистой поверхности, тогда как в [16] для энергии образования вакансии получено значение 0.474 eV . В результате энергия активации $Q^{11} = E_f^1 + E_m^{11}$ в нашем расчете несколько хуже согласуется с экспериментальным значением, чем результат *ab initio* расчета. Мы также рассмотрели процесс диффузии поверхностного палладия во второй атомный слой. Для этого была рассчитана энергия образования вакансии меди на втором слое в ближайшем к поверхностному палладию узле. Полученное значение превышает энергию образования вакансии на втором атомном слое в Cu(001) (1.38 eV) [27], что связано с различным атомным окружением, т.е. с влиянием палладия. Несмотря на то что миграционный барьер для диффузии палладия в вакантный узел второго слоя очень мал, энергия активации этого процесса Q^{12} значительно больше энергии активации диффузии в первом слое, что должно свидетельствовать о предпочтительности именно поверхностной диффузии на начальном этапе формирования сплава.

Для изучения диффузии в поверхностном упорядоченном сплаве мы рассмотрели как процесс диффузии

по поверхности (т.е. разупорядочение поверхностного сплава), так и диффузию атомов Pd во второй слой. Из таблицы видно, что энергия активации Q^{11} превышает соответствующее значение для одиночного палладия. Данный факт свидетельствует об увеличении энергии активации диффузии при росте степени покрытия. Образование вакансий меди на втором слое и миграция палладия в этот вакантный узел также имеют большие энергии, чем в случае одиночного палладия. Соответственно энергия активации диффузии в подповерхностный слой Q^{12} превышает энергию диффузии во второй слой в случае одиночного палладия в поверхностном слое. Такое соотношение энергий должно объяснять проникновение Pd в подповерхностный слой еще до того, как сформируется сплошная упорядоченная структура на поверхности, что подтверждается экспериментально [5,13,21]. В работе [20] оценка активационного барьера миграции Pd с первого слоя во второй дала 1.13 eV. Данная величина превосходит энергию активации планарной поверхностной диффузии, измеренную в [16]. Полученные в нашем расчете энергии активации правильно отражают тенденцию образования подповерхностного сплава.

Рассматривая возможные диффузионные пути для миграции палладия подповерхностного сплава, мы рассчитали как энергию активации диффузии в слое сплава, так и диффузионные барьеры для миграции палладия в первый и третий слой. Энергия образования вакансии в третьем слое E_f^3 превосходит соответствующее значение для образования вакансии на третьем слое чистой поверхности Cu(001) (1.33 eV) [27]. При этом энергия миграции E_m^{23} также высока, что определяет значительный активационный барьер Q^{23} для диффузии Pd в третий слой. Как видно из таблицы, энергия активации диффузии в слое сплава Q^{22} также достаточно высока, что должно свидетельствовать о невыгодности разупорядочения $c(2 \times 2)$ подповерхностной структуры. Для определения активационной энергии диффузии палладия в поверхностный слой мы также рассмотрели две возможности образования вакансий меди в поверхностном слое (I и II в таблице): путем миграции атомов в Cu в вакансию второго слоя и путем образования поверхностного адатома. Таким образом в первом случае энергия образования будет складываться из энергии образования вакансии меди на втором слое E_f^2 и миграции в этот вакантный узел атома Cu первого слоя. Во втором случае энергия образования вакансии, по сути, будет представлять собой энергию образования пары адатом-вакансия. Для последнего случая, кроме того, мы рассмотрели два варианта „hollow“-положения образуемого адатома: над атомом Pd и над атомом Cu. Полученное значение энергии миграции поверхностной меди в вакантный узел второго слоя E_m^{12} составляет 1.21 eV, что дает энергию образования для первого случая 2.67 eV. Как показал расчет, энергия образования пары адатом-вакансия лишь в третьем знаке зависит от выбора положения адатома: 1.225 eV над Pd и 1.224 eV над Cu (в таблице приведено одно значение с точностью до второго знака).

Энергия миграции палладия из сплава в поверхностный слой составляет 1.39 eV, в результате энергия активации процесса диффузии Pd из подповерхностного слоя на поверхность для второго (Q_{II}^{21}) и особенно для первого варианта образования поверхностной вакансии (Q_I^{21}) очень высока, что свидетельствует о стабильности подповерхностного сплава.

5. Вибрационные свойства поверхностного и подповерхностного сплавов Cu(001)- $c(2 \times 2)$ -Pd

На рис. 2 представлены рассчитанные дисперсионные кривые для поверхностного сплава Cu(001)- $c(2 \times 2)$ -Pd. Согласно экспериментальным исследованиям [21,28–30], в точке \bar{X} обнаруживается одна поверхностная мода (11.79 meV), энергия которой попадает в энергетический интервал, соответствующий энергиям рэлеевской моды чистых поверхностей меди и палладия (13.4 и 11.17 meV соответственно). Из рис. 2 видно, что наш расчет выявляет в точке \bar{X} ниже дна проекции объемных состояний три поверхностных состояния. Нижняя мода с энергией 6.82 meV характеризуется одновременным смещением атомов Pd и Cu в плоскости поверхности. Анализ этого состояния показал, что преимущественная локализация (67%) приходится на атомы Pd и оно соответствует аналогичному состоянию чистой поверхности Pd(001) с энергией 5.9 meV, определяемому экспериментально [30]. Кроме этой моды в точке \bar{X} наблюдаются два поверхностных состояния. Второе и третье состояния (с энергиями 10.96 и 12.53 meV) представляют собой типичные рэлеевские моды Pd и Cu и хорошо согласуются с экспериментальными значениями [28,29]. Состояние с энергией 13.44 meV и поперечными смещениями атомов, расположенное на границе проекции объемных состояний, полностью локализовано во втором слое подложки. В энергетической щели имеется поверхностное состояние с х-поляризацией, локализованное как на атомах Cu, так и на атомах Pd. Необходимо отметить, что в работе [22] в отличие от экспериментальных результатов и данных настоящего расчета в точке \bar{X} обнаружены две поверхностные моды, характеризующиеся одновременным смещением атомов меди и палладия. В точке \bar{M} имеются два состояния, полностью локализованные на атомах Pd с энергией 10.34 и 12.9 meV. Эти состояния соответствуют рэлеевской моде и у-поляризованной моде чистой поверхности палладия. Состояний, локализованных на атомах подложки Cu, в данной точке не обнаруживается. Для поверхности Cu(001)- $c(2 \times 2)$ -Pd характерно наличие в центре ЗБ в точке $\bar{\Gamma}$ z-поляризованных, отраженных от точки \bar{M} (принадлежащей ЗБ чистой поверхности) состояний, возникающих из-за образования новой двумерной ЗБ с периодичностью $c(2 \times 2)$. Анализ силовых постоянных показал, что в случае поверхности Cu(001)- $c(2 \times 2)$ -Pd

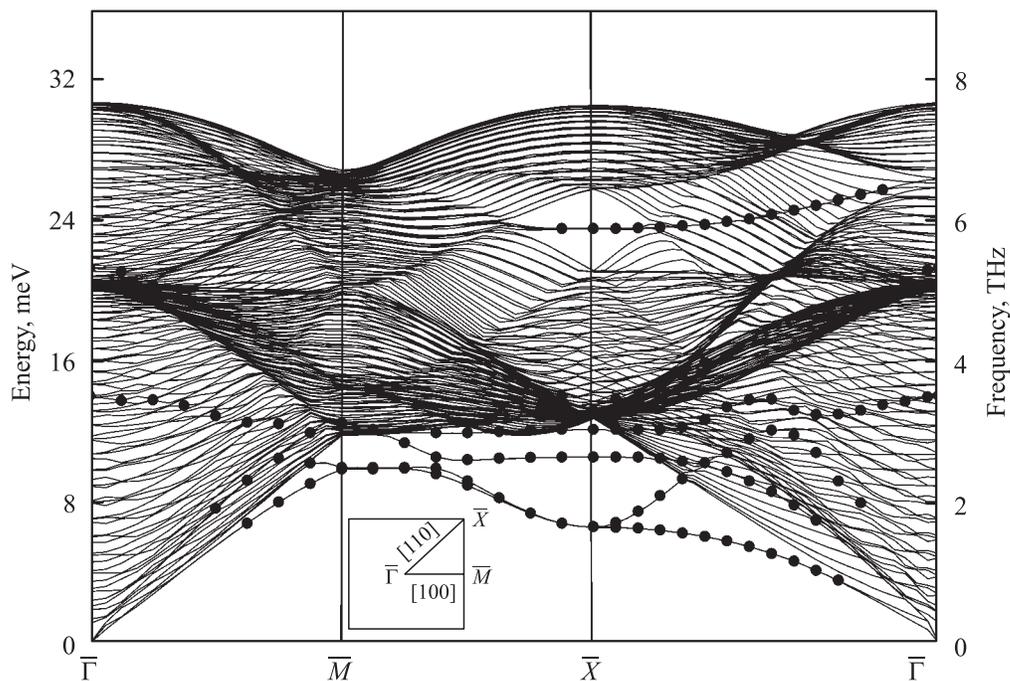


Рис. 2. Фоновый спектр поверхностного сплава $\text{Cu}(001)-c(2 \times 2)-\text{Pd}$. Точками показаны поверхностные состояния.

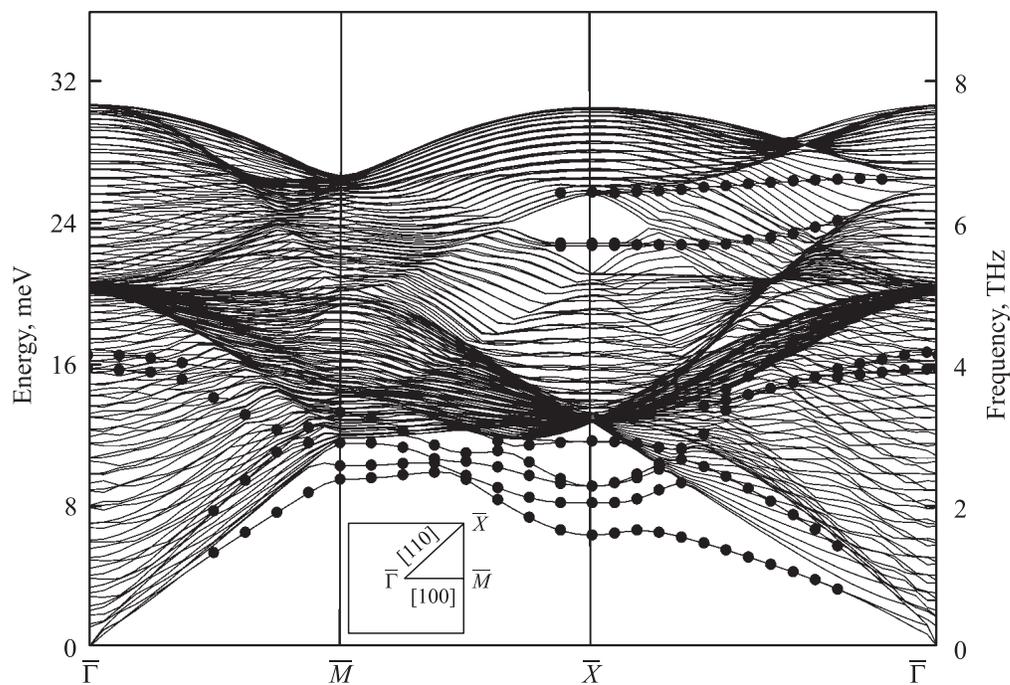


Рис. 3. Фоновый спектр подповерхностного сплава $\text{Cu}(001)-c(2 \times 2)-\text{Pd}$.

происходит усиление взаимодействия между Pd_1-Cu_1 и Pd_1-Cu_2 на 60 и 40% соответственно по сравнению с объемом. В то же время ослабевают взаимодействия Cu_1-Cu_2 (на 8%) и Pd_1-Pd_1 (на 25%) по сравнению с чистой поверхностью (цифрами 1 и 2 обозначены номера атомных слоев начиная с поверхностного). Это приводит к доминирующей роли вертикально

поляризованных колебаний, что наглядно выявляется при анализе фононного спектра. Кроме того, именно таким изменением силовых констант (при наличии атомов Pd на поверхности $\text{Cu}(001)$), а также значительным различием атомных масс можно объяснить отсутствие поверхностных состояний, локализованных на атомах меди в точке \bar{M} , и лишь незначительное

проявление рэлеевской моды меди в точке \bar{X} . При таком изменении силовых постоянных энергетически выгодным становится проникновение атомов палладия в глубь подложки. На рис. 3 представлены рассчитанные дисперсионные кривые для подповерхностного сплава $\text{Cu}(001)-c(2 \times 2)-\text{Pd}$. В отличие от случая с поверхностным расположением атомов Pd, здесь в точке \bar{X} ниже дна проекции объемных состояний обнаруживается группа поверхностных мод, локализованных преимущественно на поверхностных атомах меди Cu_1 , смещающихся в плоскости поверхности во взаимно перпендикулярных направлениях. Два следующих состояния локализованы на атомах палладия, расположенных во втором атомном слое. Мода с энергией 9.43 meV, имеющая горизонтальные поперечные смещения атомов палладия, полностью соответствует моде, локализованной на втором от поверхности $\text{Pd}(001)$ атомном слое, и хорошо согласуется с экспериментальным значением 9.47 meV [28]. У самого дна проекции объемных состояний при энергии 12.1 meV фиксируется мода, соотносящаяся с экспериментально определяемой рэлеевской модой (11.17 meV) поверхности $\text{Pd}(001)$ [29]. В отличие от поверхностного сплава в этом случае в энергетической щели обнаруживаются два состояния, преимущественно локализованные на атомах подложки с продольной поляризацией и небольшой примесью смещений атомов поверхностного слоя Cu_1 в z -направлении. Расчет силовых постоянных для данного случая показал, что взаимодействие между атомами меди Cu_1-Cu_1 ослабляется на 8% по сравнению с чистой поверхностью $\text{Cu}(001)$, а межслоевое взаимодействие Cu_1-Cu_2 возрастает на 20% по сравнению с объемом. Взаимодействие Pd_2-Cu_2 внутри слоя аналогично случаю поверхностного сплава и возрастает на 60%. Межслоевое взаимодействие между Pd_2 и атомами подложки Cu_1 и Cu_3 возрастает на 30–50% по сравнению с объемными значениями.

6. Заключение

В настоящей работе мы представили результаты исследования структуры, энергий активации диффузии и фоонных спектров поверхностного и подповерхностного упорядоченных сплавов $\text{Cu}(001)-c(2 \times 2)-\text{Pd}$. Полученные в работе с помощью метода молекулярной динамики равновесные атомные структуры сплавов в целом хорошо воспроизводят наблюдаемые экспериментально.

Анализ рассчитанных диффузионных характеристик подтверждает экспериментально установленную эволюцию поверхностного сплава: на начальном этапе осаждения происходит безактивационное внедрение палладия в вакансии меди на поверхности, при этом диффузия палладия по поверхности является предпочтительной, благодаря чему начинается образование поверхностного сплава. До полного формирования сплошного $c(2 \times 2)$ сплава в поверхностном слое начинается проникновение палладия во второй слой, в результате весь палладий диффундирует в подповерхностный слой. Таким образом, формируется двумерный подповерхностный сплав,

покрытый монослоем меди. Как в процессе образования сплава $\text{Cu}(001)-c(2 \times 2)-\text{Pd}$ во втором слое, так и после его образования для диффузии палладия из второго слоя в первый и третий существуют значительные активационные барьеры.

Анализ фоонных спектров и изменения силовых постоянных при переходе от поверхностного сплава к подповерхностному показал, что при адсорбции палладия на поверхность меди возникает очень сильное межатомное взаимодействие Cu_1-Pd_1 с одновременным ослаблением взаимодействия в чистых компонентах сплава. При этом поверхностные фоонные моды для $\text{Cu}(001)-c(2 \times 2)-\text{Pd}$ являются сильно гибридованными с доминирующей составляющей атомов палладия либо полностью определяются ими. В случае подповерхностного сплава наибольшая плотность поверхностных состояний определяется продольными колебаниями на атомах поверхностного слоя подложки при сильном внутрислоевом взаимодействии Cu_2-Pd_2 .

Список литературы

- [1] U. Bardi. Rep. Prog. Phys. **57**, 10, 939 (1994).
- [2] G.W. Graham. Surf. Sci. **171**, 1, L 432 (1986).
- [3] S.C. Wu, S.H. Lu, Z.Q. Wang, C.K.C. Lok, J. Quinn, Y.S. Li, D. Tian, F. Jona, P.M. Marcus. Phys. Rev. B **38**, 8, 5363 (1988).
- [4] T.D. Pope, G.W. Anderson, K. Griffiths, P.R. Norton, G.W. Graham. Phys. Rev. B **44**, 20, 11 518 (1991).
- [5] A.R. Koymen, K.H. Lee, G. Yang, K.O. Jensen, A.H. Weiss. Phys. Rev. B **48**, 3, 2020 (1993).
- [6] T.D. Pope, M. Vos, H.T. Tang, K. Griffiths, I.V. Mitchell, P.R. Norton, W. Liu, Y.S. Li, K.A.R. Mitchell, Z.J. Tian, J.E. Black. Surf. Sci. **337**, 1–2, 79 (1995).
- [7] J. Kudrnovsky, S.K. Bose, V. Drchal. Phys. Rev. Lett. **69**, 2, 308 (1992).
- [8] J.E. Black. Phys. Rev. B **46**, 7, 4292 (1992).
- [9] M.S. Chen, D. Terasaki, S. Mizuno, H. Tochiyama, I. Ohsaki, T. Oguchi. Surf. Sci. **470**, 1–2, 53 (2000).
- [10] J.E. Garcés, H.O. Mosca, G.H. Bozzolo. Surf. Sci. **459**, 3, 365 (2000).
- [11] M. Valden, J. Aaltonen, M. Pesa, M. Gleeson, C.J. Barnes. Chem. Phys. Lett. **228**, 6, 519 (1994).
- [12] G.W. Graham, P.J. Schmitz, P.A. Thill. Phys. Rev. B **41**, 6, 3353 (1990).
- [13] P.W. Murray, I. Stensgaard, E. Laegsgaard, F. Besenbacher. Phys. Rev. B **52**, 20, R 14 404 (1995).
- [14] M.A. Newton, S.M. Francis, Y. Li, D. Law, M. Bowker. Surf. Sci. **259**, 1–2, 45 (1991).
- [15] R.W. Vook, B. Oral. Appl. Surf. Sci. **60/61**, 681 (1992).
- [16] M.L. Grant, B.S. Swatzentruber, N.C. Bartelt, J.B. Hannon. Phys. Rev. Lett. **86**, 20, 4588 (2001).
- [17] A.K. Schmid, J.C. Hamilton, N.C. Bartelt, R.Q. Hwang. Phys. Rev. Lett. **77**, 14, 2977 (1996).
- [18] T. Flores, S. Junghans, M. Wuttig. Surf. Sci. **371**, 1, 14 (1997).
- [19] R. van Gastel, E. Somfai, S.B. van Albada, W. van Saarloos, J.W.M. Frenken. Phys. Rev. Lett. **86**, 8, 1562 (2001).
- [20] C.J. Barnes, E. Alshamaileh, T. Pitkanen, P. Kaukasoina, M. Lindroos. Surf. Sci. **492**, 1–2, 55 (2001).

- [21] J.B. Hannon, H. Ibach, P. Stoltze. Surf. Sci. **355**, 1–3, 63 (1996).
- [22] I.Yu. Sklyadneva, G.G. Rusina, E.V. Chulkov. Phys. Rev. B **68**, 4, 045 413 (2003).
- [23] S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw. Phys. Rev. B **33**, 12, 7983 (1986).
- [24] R.A. Johnson. Phys. Rev. B **39**, 17, 12 554 (1989).
- [25] S.V. Eremeev, A.G. Lipnitskii, A.I. Potekaev, E.V. Chulkov. Phys. Low-Dim. Struct. **3/4**, 127 (1997).
- [26] M. Karimi, T. Tomkowski, G. Vidali, O. Biham. Phys. Rev. B **52**, 7, 5364 (1995).
- [27] С.В. Еремеев, А.Г. Липницкий, А.И. Потекаев, Е.В. Чулков. ФТТ **39**, 8, 1386 (1997).
- [28] Y. Chen, S.Y. Tong, K.P. Bohnen, T. Rodach, K.M. Ho. Phys. Rev. Lett. **70**, 5, 603 (1993).
- [29] G. Benedek, J. Ellis, N.S. Luo, A. Reichmuth, P. Ruggerone, J.P. Toennies. Phys. Rev. B **48**, 7, 4917 (1993).
- [30] L. Chen, L.L. Kesmodel. Surf. Sci. **320**, 1–2, 105 (1994).