

## 金属高 Miller 指数表面能的分子动力学研究 \*

王晓春<sup>1)</sup> 贾瑜<sup>1,2)</sup> 姚乾凯<sup>1,2)</sup> 王飞<sup>1)</sup> 马健新<sup>1)</sup> 胡行<sup>1)</sup>

1) 郑州大学物理工程学院材料物理重点实验室, 郑州 450052

2) 河南省基础及应用科学研究所, 郑州 450052

**摘要** 利用嵌入原子型原子间相互作用势的分子动力学, 计算了金属 Al, Cu, Ni 位于两个晶带上 ([001] 晶带和  $\bar{1}10$  晶带) 一系列高 Miller 指数面的表面能. 推广了基于表面结构单元模型的经验公式. 计算结果表明, 利用本文推广的经验公式可根据几个低 Miller 指数面的表面能估计出高 Miller 指数面的表面能和表面结构特征. 最密排面的表面能最低; 最密排面 (111) 和次密排面 (110), (100) 的表面能分别是表面能值随晶向角度  $\theta$  变化曲线上的极小值; 理论模拟结果、公式计算结果和已有的实验数据三者符合得较好.

**关键词** 高 Miller 指数表面, 表面能, 分子动力学模拟

**中图分类号** TG111, O647.1

**文献标识码** A

**文章编号** 0412-1961(2004)06-0589-05

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE SURFACE ENERGIES OF HIGH-INDEX SURFACES IN METALS

WANG Xiaochun<sup>1)</sup>, JIA Yu<sup>1,2)</sup>, YAO Qiankai<sup>1,2)</sup>, WANG Fei<sup>1)</sup>, MA Jianxin<sup>1)</sup>, HU Xing<sup>1)</sup>

1) School of Physical Engineering and Key Laboratory of Physical Materials, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052

2) Fundamental and Applied Science Research Institute of Henan Province, Zhengzhou 450052

*Correspondent: JIA Yu, associate professor, Tel: (0371)7767671, E-mail: jiayu@zzu.edu.cn*

*Supported by Natural Science Foundation of Henan (No.0111050400) and Funds for Excellent Young Teacher of Universities in Henan*

Manuscript received 2003-06-05, in revised form 2003-08-18

**ABSTRACT** Interatomic potentials of the embedded atom (EAM) type and molecular dynamics simulation are used to calculate the surface energies of the high-index surfaces containing the [001] or  $\bar{1}10$  zone axis in Al, Cu and Ni. Two empirical formulas are developed based on structural unit model for high-index surfaces. The calculation result shows these formulas can be used to give an estimation of the energies of the high-index surfaces. The closest packed surfaces have the lowest surface energy and the surface energies of the closest surface (111) surface and the next closest surfaces (110) and (100) surfaces are the extremum on the curve of surface energy versus orientation angle. Both the theoretical simulation results and the empirical formula calculation results consist with the available experiment data.

**KEY WORDS** high-index surface, surface energy, molecular dynamics

金属表面能是表征金属材料表面特性的重要参量, 在表面、强度与断裂、相变等很多材料问题的研究中有广泛应用. 目前很难通过实验精确测定固态材料的表面能, 即使通过某些实验方法能获得一些简单结构晶体的表面能, 误差一般都比较大. 虽然现在已能够由基于第一性原理的分

子动力学计算出一些简单结构晶体在 0 K 时的表面能, 但要花费大量机时. 在这种情况下, 利用近年来发展的描述金属体系的经验和半经验各种多体势理论, 并结合分子动力学方法进行计算机模拟来计算材料表面能的理论值是目前确定固态材料表面能的一种最有效方法. 这种方法既具有一定的准确性, 又对计算机的要求不太高. 分子动力学具有沟通宏观特性和微观结构的作用, 对于许多在理论分析和实验观察上都难以了解的现象可以做出一定的微观解释<sup>[1-4]</sup>, 特别是对金属表面结构和金属表面能的研究已有很多报道. 利用 Daw 等<sup>[5]</sup> 和 Foiles 等<sup>[6]</sup> 的基于密度泛函和准原子理论的嵌入原子方法 (EAM) 来计

\* 河南省自然科学基金项目 0111050400 和河南省高校青年骨干教师基金项目资助

收到初稿日期: 2003-06-05, 收到修改稿日期: 2003-08-18

作者简介: 王晓春, 男, 1972 年生, 硕士生

算表面能和表面弛豫, 已成功的预言了实验上的表面弛豫行为.

以往, 对金属表面能的计算主要集中在低 Miller 指数表面<sup>[6-14]</sup>. 随着实验技术的提高, 金属材料高 Miller 指数表面的一些特性, 引起人们越来越多的关注<sup>[15-21]</sup>, 如对 Ni(755)<sup>[15]</sup>, Ni(977)<sup>[16]</sup>, Cu(115), Cu(119)<sup>[18]</sup>, Cu(117)<sup>[19]</sup> 等表面的研究. 本文采用基于嵌入原子型原子间相互作用势的分子动力学模拟, 对面心立方结构的理想单质金属 Al, Cu, Ni 位于 [001] 晶带和  $\bar{1}10$  晶带的高 Miller 指数表面的表面能和表面结构, 进行模拟计算; 根据文献 [21] 中的金属 Al, Fe 的 [001] 晶带由低 Miller 指数面的表面能来计算指定高 Miller 指数面的表面能的经验公式, 将其应用于金属 Cu, Ni 的 [001] 晶带, 计算结果符合的较好. 并将文献 [21] 中的公式推广至  $\bar{1}10$  晶带, 提出了两个新的公式, 将其应用于金属 Al, Cu, Ni 的  $\bar{1}10$  晶带. 模拟结果和已有的实验结果进行了比较, 公式计算结果与分子动力学模拟计算结果进行了比较, 符合的比较好.

## 1 物理模型与模拟方法

分子动力学模拟中, 势函数的选择非常重要, 它决定计算工作量和计算模型与真实系统的近似程度. EAM 是一种半经验函数, 对于由  $N$  个原子构成的体系, 其总能量可用镶嵌能和对势能之和来表示

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i) \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_{ij}(r_{ij}) \quad (2)$$

式中,  $F(\rho)$  为镶嵌能, 这一项包含了多体效应;  $\phi(r)$  为对势能;  $\rho_i$  为除第  $i$  个原子以外的所有其他原子的核外电子在第  $i$  个原子处产生的电子云密度之和. 计算时采用 Voter 等<sup>[22]</sup> 和 Chen 等<sup>[23]</sup> 提出的原子间相互作用势 (EAM).

初始未弛豫的表面结构体系是通过转动理想晶格的基矢, 并使之与坐标轴成一适当夹角  $\theta$  所得到的. 该结构体系的表面与  $\theta$  相对应, 具有一定晶体学取向的表面, 其 Miller 指数 ( $hkl$ ) 随  $\theta$  角的变化而发生相应规律性的变化. 采用常规的分子动力学方法对表面结构体系模拟. 在三种金属 Al, Cu, Ni 的分子动力学模拟体系中, 原子数均不少于 4000 个. 分子动力学模拟的时间步长取为  $3.2 \times 10^{-15}$  s, 小于三种理想金属中原子的平均振动周期. 金属晶体的晶格常数  $a_0$  均在零压力外部条件下, 运行  $1 \times 10^4$  个时间步长, 去掉开始时不稳定状态 3000 时间步长以内的数值, 对余下的数值求平均而得到. 对于理想面心立方结构的单质金属 Al, Cu, Ni 的晶格常数分别取 0.4049, 0.36162, 0.35203 nm. 计算表面能时, 采用其他条件均等同的两个体系, 即在所有方向上具有周期性边界条件; 在平行于自由表面的方向上具有周期性边界条

件, 而在自由表面上具有固定边界条件. 两体系分别经过分子动力学模拟, 达到平衡状态, 进而可分别求出两体系在平衡态时的能量  $E_1, E_2$ . 再根据体系二的自由表面积  $S$ , 即可求出该体系二的表面能.

## 2 计算结果与讨论

### 2.1 表面结构单元模型

表面结构单元模型的理论基础是, 如果邻位面上的原子全部准确地落在由该晶面指数所规定的几何面上, 则会引起很大的晶格畸变, 使体系的表面自由能增大. 从能量的角度考虑, 这是不利的. 反之, 如果邻位面上的原子并不准确地落在该几何面上, 而是形成多个平台和台阶, 则可以避免产生较大的晶格畸变, 从而较大程度地降低表面能. 对任一邻位面, 总能找到一组平台, 构成台阶面, 以降低表面能.

文献 [21] 根据表面结构单元模型的主要特点, 并将其运用到具有简单理想结构的单质金属晶体上, 计算出 Al, Fe 位于 [001] 晶带表面的表面能. 表面结构单元面, 是指 (100) 和 (110) 面, 对应的角度  $\theta$  分别是  $0^\circ$  和  $45^\circ$ . 位于 [001] 晶带的表面由对应的表面结构单元面来构成. 其构成规律遵从

$$1 \text{ period of}(hk0) = \alpha \text{ periods of}(100) + \beta \text{ periods of}(110) \quad (3)$$

其中, 参数  $\alpha, \beta$  根据对应表面的 Miller 指数确定. 其规律遵从

$$[hk0] = \alpha[100] + \beta[110]$$

得

$$\alpha = h - k, \beta = k. \quad (4)$$

假定沿某一晶带各个邻位面的表面能的构成, 与邻位面由对应的表面结构单元面的构成, 具有相似的规律. 由此可以利用两个低 Miller 指数表面结构单元的表面能来计算对应晶带的某一高 Miller 指数表面的表面能, 公式如下

$$\gamma_{hk0} = \frac{\alpha\gamma_{100} + \beta\sqrt{2}\gamma_{110}}{\sqrt{h^2 + k^2}} \quad (5)$$

根据上述文献 [21], 本文将其推广至 Al, Cu 和 Ni 的  $\bar{1}10$  晶带, 即从 (110) 面到 (111) 面, 再到 (001) 面. 选 (110) 面、(111) 面和 (001) 面作为  $\bar{1}10$  晶带的表面结构单元面, 对应的角度  $\theta$  分别是  $0^\circ$ ,  $\arctan(\frac{\sqrt{2}}{2})$  和  $90^\circ$ . 根据  $\bar{1}10$  晶带的特点, 提出如下公式描述面心立方金属晶体的  $\bar{1}10$  晶带

$$\begin{aligned} 1 \text{ period of}(hkl) &= \alpha \text{ periods of}(110) + \\ &\beta \text{ periods of}(111) \quad (0 < \theta < \arctan(\frac{\sqrt{2}}{2})) \quad (6) \\ 1 \text{ period of}(hkl) &= \alpha \text{ periods of}(111) + \end{aligned}$$

$$\beta \text{ periods of } (001) \quad \left(\arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) < \theta < 90^\circ\right) \quad (7)$$

其中, 参数  $\alpha, \beta$  根据对应表面的 Miller 指数  $h, k, l$  确定. 其规律遵从

$$[hkl] = \alpha[110] + \beta[111]$$

得

$$\alpha = h - l, \beta = l. \quad \left(0 < \theta < \arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right) \quad (8)$$

$$[hkl] = \alpha[111] + \beta[001]$$

得

$$\alpha = h, \beta = l - h. \quad \left(\arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) < \theta < 90^\circ\right) \quad (9)$$

利用两个低 Miller 指数表面结构单元的表面能来计算对应晶带的某一高 Miller 指数表面的表面能

$$\gamma_{hkl} = \frac{\alpha\sqrt{2}\gamma_{110} + \beta\sqrt{3}\gamma_{111}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad \left(0 < \theta < \arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right) \quad (10)$$

$$\gamma_{hkl} = \frac{\alpha\sqrt{3}\gamma_{111} + \beta\gamma_{001}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad \left(\arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) < \theta < 90^\circ\right) \quad (11)$$

其中对应角度为  $\arctan(\frac{\sqrt{2}}{2})$  的 (111) 面为上述两个公式的分界点.

### 2.2 Al, Cu, Ni 的表面能

表 1 为 Al, Cu, Ni 的三个低 Miller 指数面 (100), (110), (111) 面的表面能以及几个高 Miller 指数面 (210), (310) 和 (530) 面表面能的模拟结果和实验值、其它理论值进行的比较.

图 1a 是用分子动力学模拟方法计算出 Al 的 [001] 晶带 (范围从 (100) 面至 (110) 面) 的表面能随角度  $\theta$  变

表 1 Al, Cu, Ni 位于 [001] 晶带和  $[\bar{1}10]$  晶带上几个表面的表面能

Table 1 Energies of the surfaces containing the [001] and  $[\bar{1}10]$  zone axis in pure metals Al, Cu and Ni

Surface	J/m <sup>2</sup>				
	Simulated	Other theory	Experiment		
Al	(100)	0.92	0.93 <sup>[21]</sup>	1.35 <sup>[24]</sup>	
	(110)	1.02	0.98 <sup>[21]</sup>	1.27 <sup>[24]</sup>	1.14 <sup>[25]</sup>
	(111)	0.89	1.20 <sup>[24]</sup>	1.14 <sup>[24]</sup>	1.16 <sup>[24]</sup>
	(210)	1.06	1.01 <sup>[21]</sup>	1.15 <sup>[26]</sup>	
	(310)	1.04	1.01 <sup>[21]</sup>		
	(530)	1.05	1.01 <sup>[21]</sup>		
Cu	(100)	1.39	1.28 <sup>[25]</sup>	0.89 <sup>[20]</sup>	
	(110)	1.52	1.40 <sup>[25]</sup>	0.96 <sup>[20]</sup>	1.77 <sup>[27]</sup>
	(111)	1.29	1.17 <sup>[25]</sup>	0.84 <sup>[20]</sup>	1.79 <sup>[24]</sup>
	(210)	1.58	2.17 <sup>[26]</sup>	2.04 <sup>[26]</sup>	
	(310)	1.56	2.529 <sup>[29]</sup>	1.510 <sup>[30]</sup>	
Ni	(100)	1.76	1.58 <sup>[25]</sup>	1.75 <sup>[28]</sup>	2.45 <sup>[14]</sup>
	(110)	1.98	1.73 <sup>[25]</sup>	1.977 <sup>[28]</sup>	2.38 <sup>[25]</sup>
	(111)	1.63	1.45 <sup>[25]</sup>	1.62 <sup>[28]</sup>	2.45 <sup>[14]</sup>
	(210)	2.09	3.01 <sup>[25]</sup>	2.49 <sup>[26]</sup>	

化的曲线. 图 1a 的数据与文献 [21] 中模拟计算的结果符合得较好. 这表明, 采用基于嵌入原子型原子间相互作用势的分子动力学模拟计算单质金属 Al, Cu, Ni 的表面能的结果是可信的. 图 1a, b 是将文献 [21] 的经验公式用于金属 Cu, Ni 与模拟结果也符合较好.

图 1 和图 2 显示了 Al, Cu, Ni 的表面能随表面晶向角度  $\theta$  的变化曲线. 对于一个金属的一个晶带, 选十几个晶面分别进行公式计算和分子动力学理论计算, 把结果绘于一张图中进行比较, 图中的曲线仅仅是为了方便观察变化趋势.

图 1a 中面心立方金属晶体 Al(100) 面 ( $\theta=0^\circ$ ) 的表面能为 0.918 J/m<sup>2</sup>. 金属晶体 Al[001] 晶带上各表面的表面能随着对应的  $\theta$  的增加, 而迅速增加. 在 (710) 面, 对应的表面能值即达到 0.982 J/m<sup>2</sup>. 在达到 (210) 面时, Al 的表面能达到最高值 1.060 J/m<sup>2</sup>. 然后, Al 的表面能随角度  $\theta$  的继续增加而逐渐减小, 在 (110) 面达到一

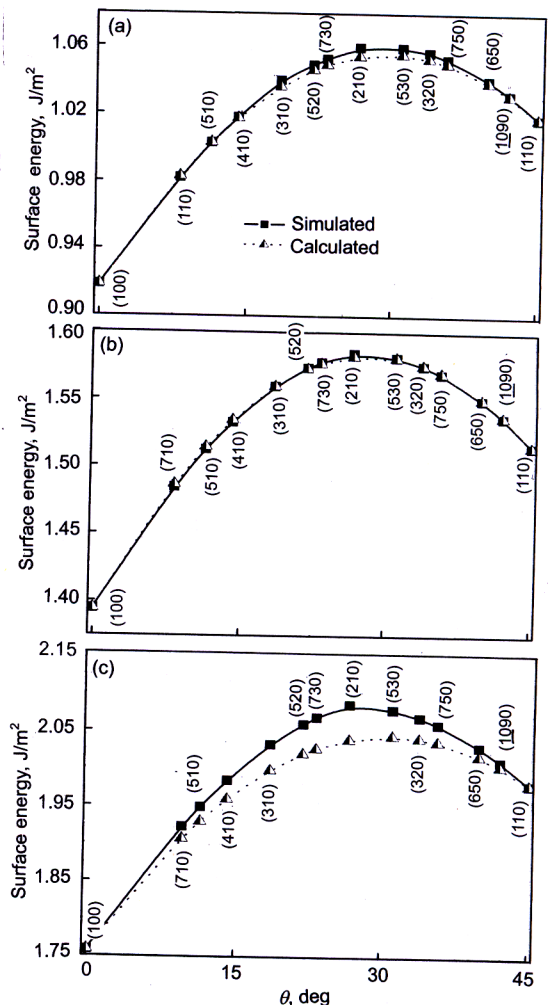


图 1 Al, Cu, Ni 表面能随面指数 (取向) 变化曲线 ([001] 带轴)  
Fig.1 Calculated curves of surface energy vs surface index (orientation) for [001] zone axis of Al (a), Cu (b) and Ni (c)

个极小值  $1.018 \text{ J/m}^2$ . 而一些高 Miller 指数面的表面能却等于或低于低 Miller 指数面 (110) 面的表面能. 如 (710), (510), (410) 等面的表面能分别为  $0.982, 1.003, 1.018 \text{ J/m}^2$ , 均小于等于  $1.018 \text{ J/m}^2$ ; (10, 9, 0) 面的表面能为  $1.032 \text{ J/m}^2$ , 小于 (310) 面的表面能  $1.040 \text{ J/m}^2$ . 这一点可以从表面结构单元模型式 (5) 做如下说明, 构成 (710), (510) 和 (410) 等高 Miller 指数表面的 (100) 周期面的个数  $\alpha$  远大于或等于 (110) 周期面的个数  $\beta$  的三倍, 而 (100) 周期面的原子密排程度大于 (110) 面, 所以这三个高 Miller 指数表面的原子密排程度大于或等于 (110) 面. 因此, 其表面能值小于或等于 (110) 面的表面能值.

图 2 和图 3 是 Al, Cu, Ni  $[\bar{1}10]$  晶带上表面的表面能随表面晶向角度  $\theta$  的变化曲线. 图 2 中表面指数的变化范围从 (110) 面到 (111) 面. 图 3 中表面指数的变化

范围从 (111) 面再到 (001) 面. 对于图 2a 金属晶体 Al(110) 面理论模拟计算的表面能为  $1.018 \text{ J/m}^2$ . 随着对应  $\theta$  的增加, Al 的理论模拟计算的表面能开始缓慢的增加. 在 (661) 面, Al 的表面能达到最高值  $1.025 \text{ J/m}^2$ . 随后, Al 的表面能随  $\theta$  的继续增加, 而较快速地减小, 在 (111) 面达到一个最小值  $0.887 \text{ J/m}^2$ . 如同 [001] 晶带上各表面的表面能一样, 仍有一些高 Miller 指数面的表面能低于低 Miller 指数面 (110) 面的表面能. 则 (994), (553), (332), (997), (776) 面的表面能分别为  $1.004, 0.977, 0.963, 0.939, 0.921 \text{ J/m}^2$ .

具有面心立方结构的金属晶体 A, Cu, Ni 的结构特征是 (111) 面是最密排面, 表面原子密度最大, (100) 面次之, (110) 面相对最低. 由图 1—3 可以清楚地看出 (111) 面的表面能最低, (100) 面和 (110) 面的表面能分别是表面能随  $\theta$  变化曲线上的一个极小值, 并且 (110) 面

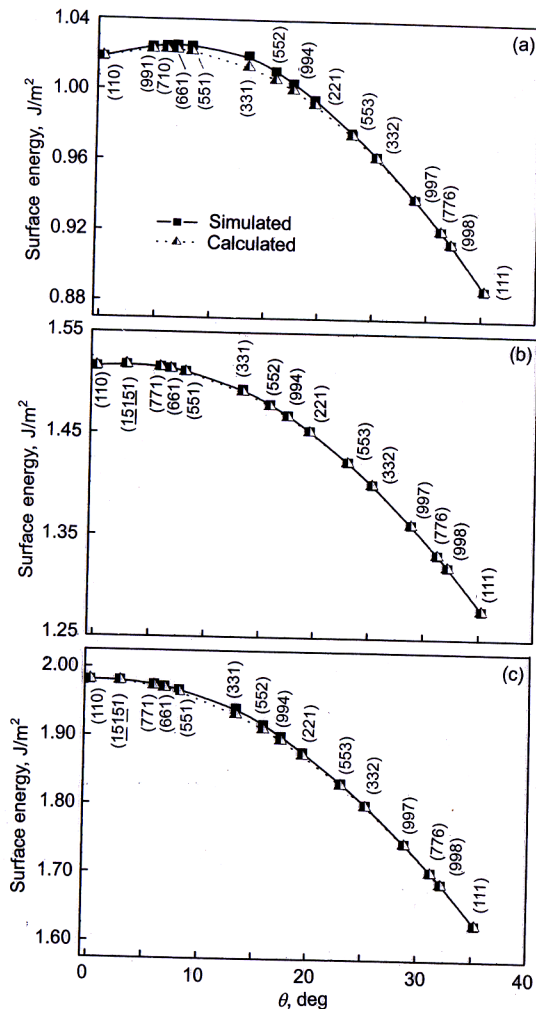


图 2 Al, Cu, Ni 表面能随面指数 (取向) 的变化曲线 ( $[\bar{1}10]$  带轴, 从 (110) 到 (111) 面)

Fig.2 Calculated curves of surface energy vs surface index (orientation) for  $[\bar{1}10]$  zone axis of Al (a), Cu (b) and Ni (c) (from (110) to (111))

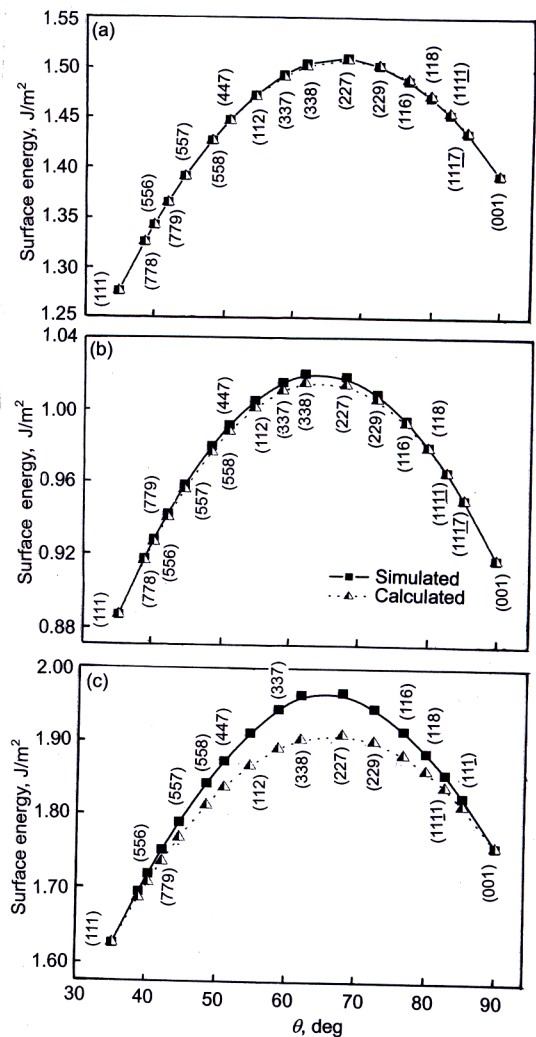


图 3 Al, Cu, Ni 表面能随面指数 (取向) 的变化曲线 ( $[\bar{1}10]$  带轴, 从 (111) 到 (001) 面)

Fig.3 Calculated curves of surface energy vs surface index (orientation) for  $[\bar{1}10]$  zone axis for Al (a), Cu (b) and Ni (c) (from (111) to (001))

的表面能值高于 (100) 面的表面能值. 本文的理论模拟结果和公式计算结果表明, 表面原子排列越紧密, 原子间相互作用越强, 从而使表面能降低.

根据表面结构单元模型理论, 利用低 Miller 指数表面作为表面单元面, 可以很容易地估算出高 Miller 指数面的表面能和表面结构特征. 对于 Al, Cu, Ni 公式计算结果和分子动力学理论模拟的理论结果都符合的相当好, 各图中两曲线的差别都小于 3%(图 3c), 并且很多差别小于 0.5%(图 1a, b, 图 2), 两者的数值非常接近.

由于拟合经验公式计算结果和理论模拟结果吻合的比较好, 因此基于表面结构单元模型理论的拟合经验公式 (5), (10) 和 (11) 是可以较准确估计高 Miller 指数表面能. 可根据实验上对几个特定低 Miller 指数面表面能的精确测量值, 利用对应的公式 (5), (10) 和 (11) 估算出对应晶带上一系列高 Miller 指数面上的表面能值.

### 3 结论

(1) 利用基于嵌入原子型原子间相互作用势的分子动力学模拟, 计算了具有理想面心立方结构的金属 Al, Cu, Ni 的 [001] 晶带 (范围从 (100) 面至 (110) 面) 和  $[\bar{1}10]$  晶带 (范围从 (110) 面至 (111) 面) 的表面能值随  $\theta$  的变化曲线. 表面原子排列越紧密, 表面能越低. 作为表面结构单元的两个低 Miller 指数面 [001] 晶带的 (100) 面和 (110) 面,  $[\bar{1}10]$  晶带的 (110) 面和 (111) 面, 其表面能值分别是曲线上的一个极小值点.

(2) 推广了基于表面结构单元模型的 [001] 晶带表面能计算公式到  $[\bar{1}10]$  晶带. 公式计算结果和理论模拟结果符合得很好. 可根据此公式, 由两个低 Miller 指数表面的表面能精确的测量值, 较准确地估计对应晶带上一系列高 Miller 指数表面的表面能值. 并且, 可以确定高 Miller 指数表面的结构特征. 本文将金属 Al, Cu, Ni 低 Miller 指数面和高 Miller 指数面的表面能的理论模拟结果、公式计算结果和已有实验结果进行了对比, 基本一致.

感谢郑州大学物理工程学院霍裕平院士对本工作的关心.

### 参考文献

- [1] Yi S P, Liu R S. *Acta Metall Sin*, 2000; 36: 1030  
(易双萍, 刘让苏. 金属学报, 2000; 36: 1030)
- [2] Liang H Y, Ni X G. *Acta Metall Sin*, 2001; 37: 833  
(梁海弋, 倪向贵. 金属学报, 2001; 37: 833)
- [3] Li J Z, Liu H. *Acta Metall Sin*, 2001; 37: 1013  
(李忠吉, 刘辉. 金属学报, 2001; 37: 1013)
- [4] Zhuang J, Liu L. *Acta Phys Sin*, 1997; 46: 2418  
(庄军, 刘磊. 物理学报, 1997; 46: 2418)
- [5] Daw M, Baskes M. *Phys Rev B*, 1984; 29: 6443
- [6] Foiles S, Baskes M, Daw M. *Phys Rev B*, 1986; 33: 7983
- [7] Barral M A, Llois A M. *Phys Rev B*, 2000; 62: 12668
- [8] Nakanishi S, Umezawa K. *Phys Rev B*, 2000; 62: 13136
- [9] Kumikov V K, Khokonov Kh B. *J Appl Phys*, 1983; 54: 1346
- [10] Zhuang J, Liu L. *Phys Rev B*, 1999; 59: 13278
- [11] Udler D, Seidman D N. *Phys Rev B*, 1996; 54: 11133
- [12] Vitos L, Ruban A V, Skriver H L. *Philos Mag B*, 1998; 78: 487
- [13] Katagiri M, Nozue Y. *Mater Sci Eng A*, 1996; 217/218: 112
- [14] Alden M, Mirbt S. *Phys Rev B*, 1992; 46: 6303
- [15] Rokuta E, Hasegawa Y. *Surf Sci*, 1999; 427-428: 97
- [16] Daniel J Gaspar, Aubrey T. *J Chem Phys*, 1998; 109: 6947
- [17] Tian Y, Lin K W, Jona F. *Phys Rev B*, 2000; 62: 12844
- [18] Reinecke N, Reiter S, Vetter S. *Appl Phys A*, 2002; 75: 1
- [19] Roth M, Pickel M, Wang J. *Appl Phys B*, 2002; 74: 661
- [20] Wolf D. *Surf Sci*, 1990; 226: 389
- [21] Mutasa B, Farkas D. *Surf Sci*, 1998; 415: 312
- [22] Voter A, Chen S. *Mater Res Soc Symp Proc*, 1987; Vol. 82: 175
- [23] Farkas D, Mutasa B, Vailhe C. *Model Simul Mater Sci Eng*, 1995; 3: 201
- [24] Vitos L, Ruban A V, Skriver H L, Kollar J. *Surf Sci*, 1998; 411: 186
- [25] Todd J R, Andrew E D. *Phys Rev B*, 1989; 39: 9967
- [26] Sinnott S B, Stave M S, Raeker T J. *Phys Rev B*, 1991; 44: 8927
- [27] Kallinteris G C, Papanicolaou N I, Evangelakis G A. *Phys Rev B*, 1997; 55: 2150
- [28] Mishin Y, Farkas D. *Phys Rev B*, 1999; 59: 3393
- [29] Rodriguez A M, Bozzolo G, Ferrante J. *Surf Sci*, 1993; 289: 100
- [30] Chen S P, Voter A F. *Surf Sci Lett*, 1991; 244: L107