

吸附诱导表面应力的分子动力学模拟

孙泽辉, 吴恒安, 王秀喜

(中国科学技术大学近代力学系, 安徽合肥 230027)

摘要:应用分子动力学方法结合镶嵌原子势, 模拟研究了同质吸附 Cu/Cu(100)和异质吸附 Al/Ni(100)纳米薄膜中的吸附诱导表面应力. 结果表明吸附原子对表面应力的影响主要源于两种原子间的相互作用; 吸附原子和底物表面原子的结合将导致底物表面原子之间的化学键的强度减弱和平衡键长增加, 从而导致表面压应力增加; 吸附原子之间的相互作用也导致表面应力的变化, 吸附原子间的吸引作用导致表面拉应力, 而排斥作用导致表面压应力. 这两种原子间相互作用所引起的表面应力与吸附原子的密度密切相关, 吸附原子与底物表面原子的结合所引起的表面应力的大小与吸附原子的密度成线性关系, 而吸附原子间的相互作用所引起的表面应力与吸附原子密度间呈非单调的依赖关系.

关键词: 吸附诱导表面应力; 分子动力学模拟; 镶嵌原子势

中图分类号: TB301 **文献标识码:** A

Molecular dynamics simulation of adsorbate-induced surface stress

SUN Ze-hui, WU Heng-an, WANG Xiu-xi

(Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: Molecular dynamics simulations combined with embedded-atom method (EAM) potentials were carried out on two adsorbate-covered nanofilms, i. e. Cu/Cu(001) and Al/Ni(001), to investigate adsorbate-induced surface stress. Results show that adatoms alter surface stress in two ways. Local interactions of chemisorbed adatoms with the underlying surface atoms result in a reduction of bond strength and an increase in equilibrium bond length between neighboring atoms in the surface, thus giving rise to compressive surface stress. Adatom-adatom interactions also give significant contribution to surface stress. Attractive adatom-adatom interactions give rise to tensile surface stress, while repulsive adatom-adatom interactions give rise to compressive surface stress. The contribution from these two types of atomic interaction to the surface stress exhibits a close association with adatom density. The surface stress induced by the adatom-substrate cohesion linearly associated with the adatom density, while the surface stress induced by the adatom-adatom interactions exhibits a nonmonotonic dependence on the adatom density.

Key words: adsorbate-induced surface stress; molecular dynamics simulation; embedded-atom method

收稿日期: 2007-03-28; 修回日期: 2007-09-25

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(10632080)资助.

作者简介: 孙泽辉, 男, 1979年生, 博士生. 研究方向: 表面/界面的原子模拟. E-mail: sunzhmd@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 吴恒安, 博士/副教授. E-mail: wuha@ustc.edu.cn; Tel: 0551-3601245

0 引言

当洁净固体表面被同质或者异质吸附原子覆盖时,将引起表面应力的改变,称之为吸附诱导表面应力.近年来,吸附诱导表面应力的问题在众多相关的学科领域中被广泛关注^[1~8].在表面物理方面,吸附诱导表面应力是固体表面重构的重要驱动力^[1,3].在薄膜材料的制备中,吸附诱导表面应力对晶体外延、成核、断层等的影响是至关重要的^[4,5].在超分子和生物化学方面,在界面上分子自组织和生物分子识别能够借助于吸附诱导表面应力来研究^[6,7].另外,原子力显微镜(atomic force microscope, AFM)也是利用吸附诱导表面应力作为其工作机理的.

Ibach^[1,2]和 Haiss^[3]总结了大量的吸附诱导表面应力的实验结果. Feibelman^[9]定性地讨论了各种因素对吸附诱导表面应力的可能贡献,这些因素包括:吸附原子与表面原子间的相对电负性,功函数的变化,以及成键轨道和反键轨道的饱和度等.同时 Feibelman^[9]也指出所有这些因素都不能单独构成吸附诱导表面应力的成因,而且在不同吸附系统中,这些因素的相对贡献量也各不相同.对吸附诱导表面应力做出正确的讨论除了需要这些实验获得的应力数据外,有关吸附层和底物的结构也很重要.最近的计算^[10~12]和实验^[13~15]结果表明吸附可诱导底物晶格的显著畸变.一个可靠的吸附诱导表面应力模型应该将这些因素都考虑进去.到目前为止,对于吸附诱导表面应力的电子起源问题还没有形成一个完整的解释.

以上是对吸附诱导表面应力的电子起源的分析.如果仅从原子层次来看,吸附诱导表面应力可以分解为两大部分:一部分来源于因吸附原子与底物表面原子的结合导致底物表面原子间相互作用的改变,另一部分来源于吸附原子间的相互作用.就吸附诱导表面应力的实验测量来说,AFM 实验测量的是总的表面应力改变,无法指出所测量的总的应力改变中有多少是起源于表面原子间相互作用的改变,有多少起源于吸附原子间相互作用的改变.到目前为止,理论计算也仅限于计算总的应力改变.虽然,也有理论^[16~19]和实验^[20~22]的方法研究了金属和半导体表面吸附原子的几何分布和吸附原子间的相互作用,但是对吸附原子间相互作用对表面应力的相对贡献量,并没有一个明确的阐述.本文将通过对同质和异质吸附系统的分子动力学模拟来研究这

个问题,以期增加对表面应力的理解.

对于表面应力的计算,大都采用第一原理的方法.与经典势函数相比,第一原理的方法不但可以获得表面应力较精确的数值,而且可以同时得到表面原子以及吸附原子的电子结构数据,因而可以给出计算结果一个电子层次的说明.但是第一原理方法需要考虑电子的自由度,计算量太大,目前的计算机技术所能提供的计算能力也仅仅限于原子簇和几百个原子以内体系的计算.鉴于目前基于电子结构的计算还无法很好的解释表面/界面应力的起源,以及第一原理的计算效率的低下,这里拟采用经典的方法,即采用镶嵌原子势^[23~25]来模拟金属原子间的相互作用.采用经典的镶嵌原子(embedded-atom method, EAM)势,虽然得不到电子结构的相关信息,但可以实现本文的从原子间相互作用层次来模拟研究吸附诱导表面应力的目标.另外,EAM 势通常会“低估”固体的表面能和表面应力,但是其结果可以作为获得一个很好的定性认识的基础.

1 计算方法

本文分子动力学模拟的对象是一个由吸附原子和底物纳米单晶薄膜构成的吸附系统.采用两种模型,一种是同质吸附模型,底物是纳米单晶铜薄膜,吸附原子是铜原子,原子间势函数采用 Mishin 的铜 EAM 势^[26];另一种模型是异质吸附模型,底物薄膜是镍单晶,吸附原子是铝原子,原子势函数是 Mishin 的 Ni-Al 原子势^[27].计算元胞的几何构形如图 1 所示.立方晶格的 $[100]$, $[010]$, $[001]$ 方向分别与坐标系的 x , y 和 z 轴平行.计算元胞沿 x , y 和 z 三个方向的长度为 $10a \times 48a \times 6a$,其中 a 是晶格常数.在计算元胞垂直于 y 轴的边界上施加周期性边界条件,并在模拟中采用等体积控制方法来模拟无穷大平面应变薄膜.垂直于 x 和 z 轴的边界是薄膜的自由表面.在垂直于 z 轴的上表面上均匀分布着吸附原子.当吸附面上的表面应力改变时,薄膜将在 xy 坐标面内发生弯曲变形.因为这是一个平面应变的模型,吸附原子设计成按列均匀排列.模拟中,首

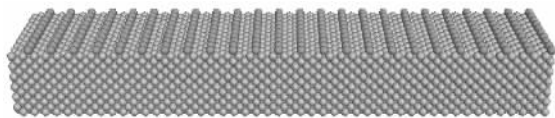


图 1 模型几何示意图

Fig. 1 A schematic illustration of the model

先由理想晶格构造单晶底物薄膜和均匀分布的吸附原子列,然后利用动量弛豫的方法对体系进行分子动力学弛豫,得到所给约束条件下的最低能量构形。

文献中报道的吸附诱导表面应力的计算大都采用能量计算的方法,即画出表面能和应变的曲线,由零应变附近的表面能曲线斜率得到表面应力的方法。该方法虽然需要对同一模型计算一系列应变下系统的表面(界面)能,但是比较适合第一原理计算的规模很小的原子系统。因本文采用经典方法来计算一个薄膜吸附系统,系统可以取得足够大,采用吸附诱导薄膜弯曲的方法更加方便。

众所周知,洁净金属表面存在一个正的表面应力,即表面拉应力。对于一个具有洁净表面的纳米单晶薄膜,由于上下表面的表面应力相等,因而整个薄膜不会出现弯曲现象。当薄膜的一个表面例如上表面吸附有原子的时候,该表面的表面应力将发生变化,从而导致上、下表面的表面应力不相等,薄膜发生弯曲变形。假设表面应力不依赖于应变的变化而变化,当平面应变薄膜上、下表面的表面应力的不等而产生弯曲时表面能的改变可由下面的式子给出:

$$U_s = -\tau_{xx}\kappa h/2. \quad (1)$$

式中, τ_{xx} 为上、下表面的表面应力之差,也就是吸附诱导表面应力; κ 和 h 分别表示底物薄膜的曲率和厚度。薄膜发生弯曲的时候,除了引起上、下表面的表面能变化之外,还存在一个弯曲应变能。这里对平面应变薄膜引入 Euler 和 Bernoulli 假设,有

$$\epsilon_{xx} = \kappa y. \quad (2)$$

这里 y 是从中性面开始计算的。根据平面应变条件,有 $\epsilon_{xx} = \frac{1-\nu^2}{E}\sigma_{xx}$ 。薄膜弯曲的弹性应变能密度的微分表达式为

$$\delta u(y) = \sigma_{xx}\delta\epsilon_{xx} = \frac{E}{1-\nu^2}\epsilon_{xx}\delta\epsilon_{xx}. \quad (3)$$

积分式(3)可以得到平面应变薄膜弯曲的弹性应变能密度

$$u(y) = \int_0^{\epsilon_{xx}} \sigma_{xx}\delta\epsilon_{xx} = \int_0^{\epsilon_{xx}} \frac{E}{1-\nu^2}\epsilon_{xx}\delta\epsilon_{xx} = \frac{E}{2(1-\nu^2)}\epsilon_{xx}^2. \quad (4)$$

将式(2)代入式(4),得到

$$u(y) = \frac{E}{2(1-\nu^2)}\kappa^2 y^2. \quad (5)$$

将式(5)沿薄膜厚度方向求积分,可得到薄膜弯曲时单位面积的应变能

$$U_b = \int_{-h/2}^{h/2} u(y)\delta y = \int_{-h/2}^{h/2} \frac{E}{2(1-\nu^2)}\kappa^2 y^2 \delta y = \frac{E\kappa^2 h^3}{24(1-\nu^2)}. \quad (6)$$

综合以上,弯曲薄膜的总的能量变化为

$$U(\kappa) = U_s + U_b = -\frac{\tau_{xx}\kappa h}{2} + \frac{E\kappa^2 h^3}{24(1-\nu^2)}. \quad (7)$$

使总能量 $U(\kappa)$ 取极小值的曲率即为平衡构形的曲率。平衡曲率和吸附诱导表面应力 τ_{xx} 关系为

$$\tau_{xx} = \frac{E\kappa h^2}{6(1-\nu^2)}. \quad (8)$$

平面应变梁的弯曲刚度可以表达为

$$D = \frac{Eb h^3}{12(1-\nu^2)}. \quad (9)$$

将式(9)代入式(8),得到

$$\tau_{xx} = D \frac{2\kappa}{bh}. \quad (10)$$

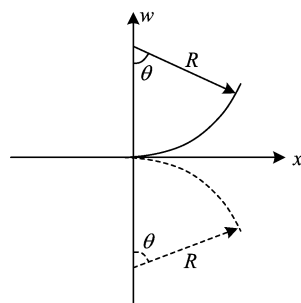
根据吸附诱导表面应力的分布特征,吸附诱导弯曲挠度曲线应该是圆弧线,因此沿挠度曲线上各点的曲率是一个常数,为圆弧半径 R 的倒数。如图 2 所示,当 $\tau_{\max} > 0$ 的时候(实线部分),

$$\cos\left(\frac{l}{R}\right) = \frac{R - \tau_{\max}}{R}; \quad (11)$$

当 $\tau_{\max} < 0$ 的时候(虚线部分),

$$\cos\left(\frac{l}{R}\right) = \frac{R + \tau_{\max}}{R}. \quad (12)$$

式中, l 是薄膜的长度, τ_{\max} 是薄膜的最大挠度。解上面的超越方程即可由最大挠度值 τ_{\max} 得到圆弧半径 R ,从而得到曲率 κ 。



实线部分表示 $\tau_{\max} > 0$ 的情形,虚线部分表示 $\tau_{\max} < 0$ 的情形

图 2 薄膜吸附诱导弯曲挠度与曲率的几何关系

Fig. 2 The geometric relationship between the film deflection and curvature

2 计算结果

2.1 同质吸附诱导表面应力

分子动力学模拟结果显示,在纳米单晶铜薄膜

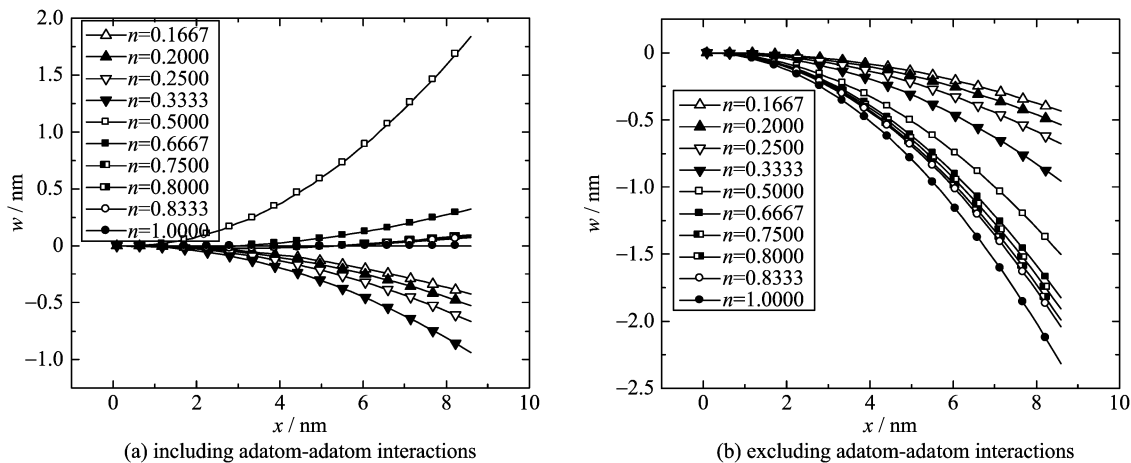


图 3 同质吸附原子诱导纳米单晶铜薄膜的挠度曲线

Fig. 3 The deflection of nanosized crystal Cu film induced by homoadsorption of Cu atoms

表面吸附铜原子, 将导致底物薄膜的表面应力发生改变, 从而引起纳米单晶铜薄膜的弯曲. 对应于不同吸附原子密度的纳米单晶铜薄膜的挠度曲线见图 3. 图 3(a) 表示的是同时考虑吸附原子导致表面原子间相互作用的改变以及吸附原子间相互作用这两种效应的影响时的情况; 而图 3(b) 表示只考虑吸附原子导致表面原子间相互作用改变时的情况. 两种条件下单晶铜底物薄膜的最大挠度与吸附原子密度间的关系由图 4 给出. 利用式(10), 可以计算得到两种情况下吸附诱导表面应力与吸附原子密度间的关系, 如图 5.

从图 5 可以看出, 吸附诱导底物薄膜表面原子间相互作用的改变产生表面压应力. 由于是同质吸附, 吸附原子与底物表面原子间的化学键将不会产

生极化现象, 不会在吸附物和底物表面之间发生电荷转移, 因而可以根据 Pauling 的键级-键长关联理论来进行讨论. 根据该理论, 吸附原子与底物表面原子间的结合将增加底物薄膜表面原子的配位数, 从而削弱底物表面原子的单个键的强度, 增大底物表面原子间化学键的平衡键长, 于是引起洁净金属表面拉应力的降低. 吸附诱导底物表面原子间相互作用的改变将产生表面压应力, 而且图 5 表明这部分的压应力的大小和吸附原子间的密度成线性关系.

根据同质吸附的特点, 吸附原子之间的作用不可能是极化原子或者离子实之间的库仑排斥作用, 而是相同电中性原子间的键合作用. 吸附原子间的相互作用在原子间距离进入成键距离, 即对应的吸附原子密度大于 0.4 ML 才显著. 当吸附原子的密

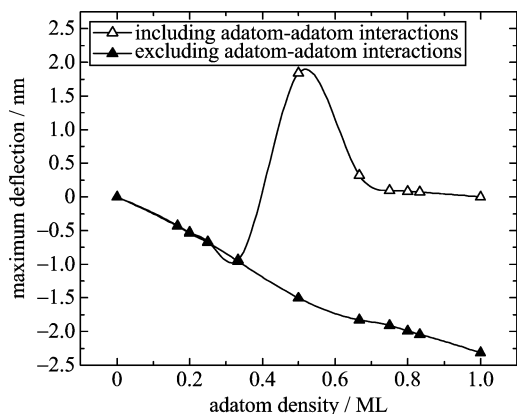


图 4 同质吸附诱导薄膜最大弯曲挠度与吸附原子密度间的关系

Fig. 4 The maximum homoadsorption induced deflection versus the adatom density

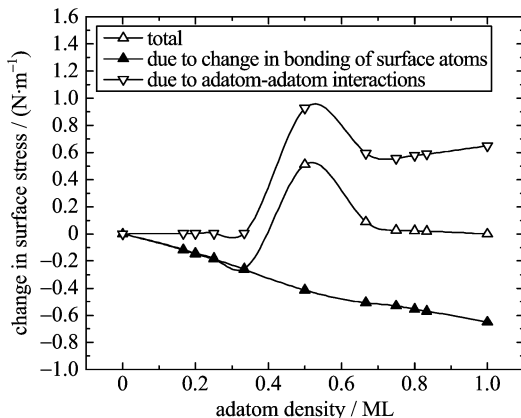


图 5 同质吸附诱导表面应力与吸附原子密度的关系

Fig. 5 The homoadsorption induced surface stress versus the adatom density

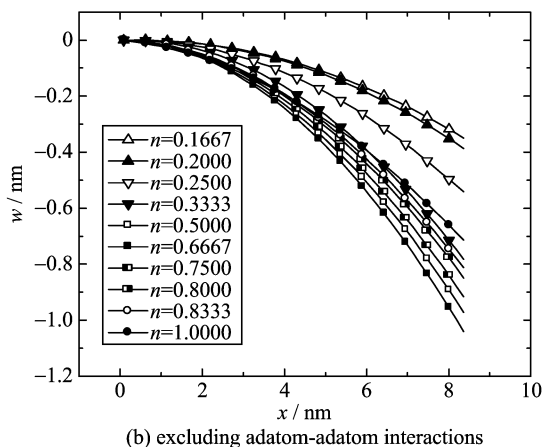
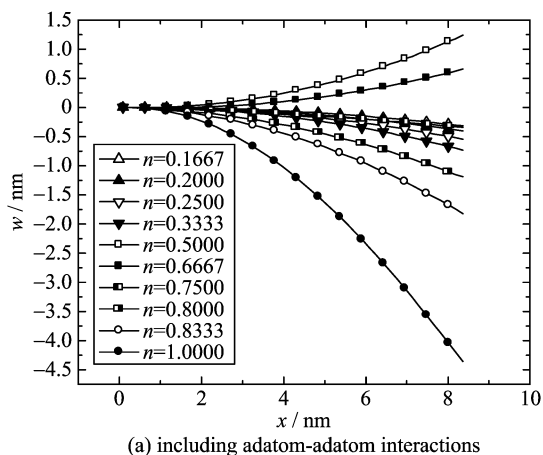


图 6 异质吸附原子诱导纳米单晶镍薄膜的挠度曲线

Fig. 6 The deflection of nanosized crystal Ni film induced by heteroadsorption of Al atoms

度为 0.5 ML 的时候,因为相互作用的吸附原子间的距离较大,远远大于平衡键长,吸附原子间表现为很强的吸引作用. 吸附原子间相互作用导致的表面应力是拉应力. 随着吸附原子密度的进一步增加并趋于形成新的完整表面,吸附原子之间的距离渐渐趋于平衡键长,相互间的吸引作用也渐渐减小,并趋于一稳定值,即大致相当于两倍洁净金属铜表面的表面拉应力.

总体看来,在低覆盖密度范围内,吸附诱导表面应力中由底物表面原子间的相互作用改变产生的表面压应力占主导地位. 在中覆盖密度范围内,由于吸附原子间的距离进入成键范围内,吸附原子之间很强的相互吸引作用将引起很大的表面拉应力,这部分的表面拉应力将完全抵消底物表面相互作用的变化产生的表面压应力,使总的吸附诱导表面应力表现为拉应力. 在高覆盖密度范围内,随着吸附原子密度的进一步增加并趋于形成新的完整表面,吸附原子之间的距离渐渐趋于平衡键长,相互间的吸引作用也渐渐减小,吸附原子之间相互作用引起的表面拉应力迅速减小,趋于一稳定值,并将线性单调增加的底物表面原子相互作用改变引起的表面压应力抵消掉. 最终,新形成的完整表面的上表面应力和下表面的表面应力相等,薄膜曲率趋于零.

2.2 异质吸附诱导表面应力

纳米单晶镍薄膜表面吸附 Al 原子将导致镍底物薄膜的表面应力改变,从而引起纳米单晶镍薄膜的弯曲. 不同吸附原子密度下铜单晶薄膜的挠度曲线见图 6. 图 6(a)所示的是同时考虑吸附原子导致表面原子间相互作用的改变以及吸附原子间相互作

用影响时单晶铜薄膜弯曲的情况;而图 6(b)表示只考虑吸附原子对表面原子相互作用改变时的情况. 两种条件下单晶铜底物薄膜的最大挠度与吸附原子间密度间的关系由图 7 给出.

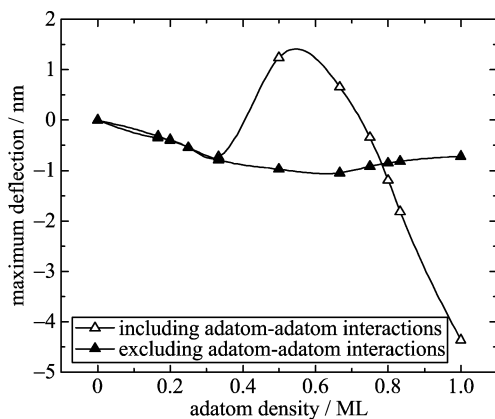


图 7 异质吸附诱导薄膜最大挠度与吸附原子密度间的关系

Fig. 7 The maximum heteroadsorption induced deflection versus the adatom density

Ibach^[1,2]曾经用电荷转移模型来说明吸附诱导表面应力的起源. 按照电荷转移模型,在异质吸附中,价电子将会由电负性低的原子向电负性高的原子转移. 如果吸附原子的电负性低于底物原子,吸附原子的价电子会部分转移到底物表面原子周围,这样将会加强表面拉应力. 相反,如果吸附原子的电负性高于底物原子,底物表面原子的部分价电子将向附近的吸附原子上转移,这样,将会引起吸附诱导表面压应力. 在这个模型中,异质吸附的吸附原子之间的相互作用是极化原子或者离子实间的库仑斥力.

但是碱金属-金属的吸附实验^[20~21]证明吸附原子间存在吸引作用. 实验^[28]和理论计算^[29]结果表明, 在碱金属的吸附实验中, 电荷的转移很不显著. 对于电负性相差很大的碱金属/金属的异质吸附中尚且如此, 对于 Al/Ni(100)的异质吸附, 吸附层和表面原子间的电荷转移效应可以忽略. 从图 8 可以看出, 对于 Al/Ni(100)异质吸附的情形, 吸附诱导底物薄膜表面原子间相互作用的改变产生表面压应力, 而不是电荷转移模型预测的拉应力, 仍然遵从 Pauling 的键级-键长关联理论. 并且, Al/Ni(100)吸附中, 吸附诱导底物表面原子间相互作用的改变产生的表面压应力在低覆盖率的范围内, 近似成线性关系.

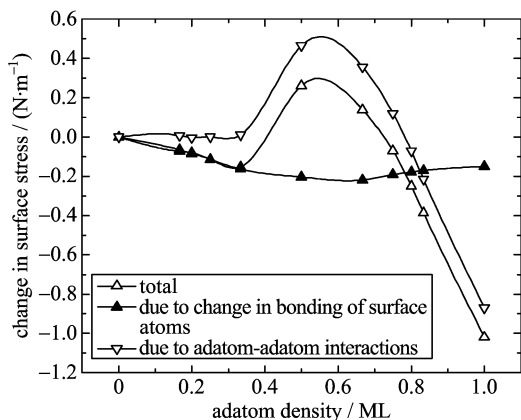


图 8 异质吸附诱导表面应力与吸附原子密度间的关系

Fig. 8 The heteroepitaxy induced surface stress versus the adatom density

虽然是异质吸附, 由于吸附原子和底物表面原子间的电荷转移效应不显著, 所以吸附原子间仍然是原子间的键合作用. 和 Cu/Cu(100)同质吸附相类似, 在吸附原子的密度为 0.5 ML 的中覆盖范围内, 吸附原子间存在很强的吸引作用, 吸附原子间相互作用导致的表面应力是拉应力. 随着吸附原子密度的进一步增加, 吸附原子之间的距离渐渐趋于平衡键长, 相互间的吸引作用也渐渐减小. 当吸附原子密度达到 0.76 ML 的时候, 此时的吸附原子间距达到 Al 的体相晶格常数, 吸附原子间的吸引作用趋于零. 当吸附原子的密度进一步增加的时候, 吸附原子间的键合作用转化为排斥力. 此时吸附原子间的相互作用引起的表面应力为表面压应力.

总体看来, 在 Al/Ni(100)异质吸附中, 吸附诱导表面应力与吸附原子密度的关系和 Cu/Cu(100)相似. 在低覆盖密度范围内, 吸附诱导表面应力中由底物表面原子间的相互作用改变产生的表面压应力

占主导地位. 在中覆盖密度范围内, 由于吸附原子间的距离进入成键范围内, 吸附原子之间很强的相互吸引作用将引起很大的表面拉应力, 这部分的表面拉应力将完全抵消由底物表面原子相互作用的改变所产生的表面压应力, 使总的吸附诱导表面应力表现为拉应力. 不同的是在高覆盖密度范围内, 随着吸附原子密度的进一步增加, 吸附原子的间距小于吸附原子平衡键长, 吸附原子间的相互作用力是排斥力, 原子间相互作用引起的表面应力是表面压应力.

3 结论

本文通过对 Cu/Cu(100)同质吸附以及 Al/Ni(100)异质吸附纳米薄膜的分子动力学模拟, 详细研究了吸附诱导表面应力的起源. 结果表明, 吸附原子对表面应力的影响主要源于吸附原子和底物薄膜表面原子间的相互作用, 以及吸附原子间相互作用. 吸附原子和底物表面原子的结合将导致底物表面原子之间的化学键的强度减弱和平衡键长增加, 从而导致表面压应力. 这部分的吸附诱导表面压应力的大小与吸附原子的密度成线性关系, 并且在低覆盖密度下占主导地位. 吸附原子之间的相互作用也导致表面应力的变化: 吸附原子间的吸引作用导致表面拉应力, 而排斥作用导致表面压应力. 这部分的吸附诱导表面应力只在中高覆盖密度范围内, 当吸附原子间距进入成键距离时才表现出来, 与吸附原子密度之间呈现非单调的依赖关系.

参考文献 (References)

- [1] Ibach H. The role of surface stress in reconstruction, epitaxial growth and stabilization of mesoscopic structures [J]. Surface Science Reports, 1997, 29: 193-263.
- [2] Ibach H. Adsorbate-induced surface stress[J]. Journal of Vacuum Science and Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 1994, 12(4): 2 240-2 245.
- [3] Haiss W. Surface stress of clean and adsorbate-covered solids[J]. Rep Prog Phys, 2001, 64: 591-648.
- [4] Spaepen F. Interfaces and stresses in thin films[J]. Acta Materialia, 2000, 48(1):31-42.
- [5] Cammara R C. Surface and interface stress effect in thin film[J]. Prog Surf Sci, 1994,46:1-38.
- [6] Berger R, Delamarche E, Lang H P, et al. Surface stress in the self-assembly of alkanethiols on gold[J]. Science, 1997, 276(5321):2 021-2 014.
- [7] Fritz J, Baller M K, Lang H P, et al. Translating

- biomolecular recognition into nanomechanics [J]. Science, 2000, 288:316-318.
- [8] Lavrik N V, Tipple C A, Sepaniak M J, et al. Enhanced chemo-mechanical transduction at nanostructured interfaces[J]. Chem Phys Lett, 2001, 336:371-376.
- [9] Feibelman P J. First-principles calculations of stress induced by gas adsorption on Pt(111)[J]. Phys Rev B, 1997, 56: 2 175-2 182.
- [10] Feibelman P J, Stumpf R. Adsorption-induced relaxation and diffusion by concerted substitution[J]. Phys Rev B, 1999, 59: 5 892-5 997.
- [11] Stepanyuk V S, Bazhanov D A, Baranov A N, et al. Strain relief and island shape evolution in heteroepitaxial metal growth[J]. Phys Rev B, 2000, 62:15 398-15 401.
- [12] Lysenko O V, Stepanyuk V S, Hergert W, et al. Mesoscopic relaxation in homoepitaxial metal growth [J]. Phys Rev Lett, 2002, 89: 126 102.
- [13] Cohen C, Ellmer H, Guigner J M, et al. Surface relaxation in near surface atomic displacements in the N/Cu(100) self-ordered system[J]. Surf Sci, 2001, 490:336-350.
- [14] Croset B, Girad Y, Prevot G, et al. Measuring surface stress discontinuities in self-organized systems with X rays[J]. Phys Rev Lett, 2002, 88:0561031.
- [15] Sander D, Ouazi S, Stepanyuk V S, et al. Stress oscillations in a growing metal film[J]. Surf Sci, 2002, 512:281-286.
- [16] Kato T. Attractive interaction between alkali-metal adatoms on metal surfaces[J]. Phys Rev B, 1993, 47: 13 895-13 898.
- [17] Neugebauer J, Scheffler M. Adsorbate-substrate and adsorbate-adsorbate interactions of Na and K adlayers on Al(111)[J]. Phys Rev B, 1992, 46:16 067-16 080.
- [18] Stepanyuk V S, Baranov A N, Hergert W, et al. Ab initio study of interaction between magnetic adatoms on metal surfaces[J]. Phys Rev B, 2003, 68:205 422.
- [19] Brako R, Sokcevic D. Interaction of CO molecules adsorbed on metal surfaces[J]. Vacuum, 2001, 61:89-93.
- [20] Aruga T, Tochihara H, Murata Y. Two-dimensional condensation of K adatoms on Cu(001)[J]. Surf Sci, 1986, 175: L725- L729.
- [21] Modesti S, Chen C T, Ma Y, et al. Two-dimensional condensation of potassium on Ag(001)[J]. Phys Rev B, 1990, 42:5 381-5 384.
- [22] Tsong T T. Experimental studies of the behavior of single adsorbed atoms on solid surfaces[J]. Rep Prog Phys, 1988, 51:759-832.
- [23] Daw M S, Baskes M I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals[J]. Phys Rev Lett, 1983, 50:1 285-1 288.
- [24] Daw M S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method[J]. Phys Rev B, 1989, 39: 7 441-7 452.
- [25] Daw M S, Foiles S M, Baskes M I. The embedded-atom method: A review of theory and applications[J]. Materials Science Reports, 1993, 9: 251-310.
- [26] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations [J]. Phys Rev B, 2001, 63: 224 106.
- [27] Mishin Y. Atomistic modeling of the γ and γ' -phases of the Ni-Al system[J]. Acta Materialia, 2004, 52: 1 451-1 467.
- [28] Riffe D M, Wertheim G K, Citrin P H. Alkali-metal adsorbates on W(110): Ionic, covalent, or metallic? [J]. Phys Rev Lett, 1990, 64: 571-574.
- [29] Ishida H, Terakura K. First-principles study of the coverage dependence of the electronic structure of alkali-metal-metal surfaces: Na on Al(001)[J]. Phys Rev B, 1988, 38: 5 752-5 755.