

Pt(110)表面自吸附原子能量和力的改进分析型 嵌入原子法分析*

舒 瑜¹⁾ 张建民^{1)†} 徐可为²⁾

1) 陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710062)

2) 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 西安 710049)

(2005 年 8 月 10 日收到, 2006 年 3 月 20 日收到修改稿)

采用改进分析型嵌入原子法计算了 Pt(110)表面自吸附原子的能量和法向力. 当 Pt 吸附原子位于 Pt(110)表面第一层原子的二重对称洞位上 0.11 nm 时最稳定. Pt 吸附原子的最佳迁移路径是由一个二重对称洞位沿密排方向迁移到最近邻的另一个二重对称洞位. 在吸附原子远离表面的过程中, 将依次经过排斥、过渡和吸引等三个区域. 在排斥区和过渡区, 由于吸附原子与表面原子间强的相互作用势, 吸附原子的能量和法向力的形貌图均为(110)面原子排列的复形, 与对势理论和嵌入原子法得到的结果一致. 在吸引区, 由于多体相互作用及晶体中原子电子密度的非球型对称分布影响的相对增强, 使吸附原子的能量和法向力的形貌图更加复杂.

关键词: 金属表面, 自吸附, 能量, 力

PACC: 3450D, 6770, 6810J, 8265M

1. 引 言

吸附在金属表面的气体或金属原子的能量、力和构形是研究许多表面现象如腐蚀、氧化、催化和晶体生长的基础. 许多现代实验技术如场离子显微镜^[1]、扫描隧道显微镜^[2]、原子力显微镜^[3]等已被广泛用于观察金属表面吸附原子的位置和迁移路径或测量金属表面对吸附原子的作用. 除实验研究外, 蔡建秋等^[4]利用密度泛函理论研究了 Cu(100) ($\sqrt{2} \times \sqrt{2}$)R45°氧原子吸附表面结构与电子态. 李红海等^[5]利用第一性原理对分子和金表面相互作用进行了研究. Komiyama 等^[6]利用对势理论研究了吸附在 Cu(100)表面的 Fe 原子的作用力, 但对势理论只考虑系统中原子间的相互作用势而未考虑多体相互作用. Katagiri 等^[7]利用嵌入原子法(EAM)对 Pt(100)表面自吸附原子的力也进行了分析, 尽管基于局域电子密度理论发展的 EAM^[8,9]考虑了多体相互作用, 把系统中一个原子的能量表示成两部分之和: 在由其他原子产生的局域电子密度中再嵌入一个原子

的嵌入能与嵌入原子与其他近邻原子间的静电相互作用势能之和, 但这个局域电子密度被看作是其他原子的球对称电子密度的线性叠加, 而没有考虑晶体中原子电子密度分布的方向性. 为此, 分别发展了改进型 EAM^[10]和改进分析型嵌入原子方法(MAEAM)^[11-14]. 我们曾利用这两种方法计算了表面能^[15-17]、晶界能^[18-20]、界面能^[21-23], 对许多有关表面和界面的实验结果给出了令人满意的解释.

本文采用 MAEAM 计算了 Pt(110)表面自吸附原子的能量和垂直于表面的法向力, 发现 Pt 吸附原子在 Pt(110)表面的最稳定位置为第一层原子的二重对称洞位上 0.11 nm 处, 并且其最佳迁移路径是由一个二重对称洞位沿密排方向迁移到最近邻的另一个二重对称洞位, 这一最佳迁移路径已在实验^[24,25]中得到了证实.

2. MAEAM

在 MAEAM 模型中, 系统的总能量 E_{total} 表示为^[14]

* 国家重点基础研究发展规划(批准号: 2004CB619302)和国家自然科学基金(批准号: 50271038)资助的课题.

† E-mail: jianm_zhang@yahoo.com

$$E_{\text{total}} = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) + \sum_i M(P_i), \quad (1)$$

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

$$P_i = \sum_{j \neq i} f^2(r_{ij}), \quad (3)$$

式中, $F(\rho_i)$ 是在除第 i 个原子外的其他原子组成的基体中再嵌入第 i 个原子的嵌入能, 它仅是其他原子在第 i 个原子所在处产生的背景电子密度 $\rho_i = \sum_{j \neq i} f(r_{ij})$ 的函数, $f(r_{ij})$ 是第 j 个原子在第 i 个原子所在处产生的电子密度, r_{ij} 是第 i 个原子和第 j 个原子间的距离; $\phi(r_{ij})$ 是第 i 个原子和第 j 个原子间的相互作用势; $M(P_i)$ 是修正项, 表示原子电子密度非球型对称分布所引起的系统总能量的变化. 嵌入函数 $F(\rho_i)$ 、原子间的相互作用势 $\phi(r_{ij})$ 、修正项 $M(P_i)$ 和电子密度函数 $f(r_{ij})$ 采用如下形式^[11, 14]:

$$F(\rho_i) = -F_0 [1 - n \ln(\rho_i/\rho_e)] (\rho_i/\rho_e)^n, \quad (4)$$

$$\phi(r_{ij}) = k_0 + k_1(r_{ij}/r_{1e})^2 + k_2(r_{ij}/r_{1e})^4 + k_3(r_{1e}/r_{ij})^2, \quad (5)$$

$$M(P_i) = \alpha \left(\frac{P_i}{P_e} - 1 \right)^2 \exp \left[- \left(\frac{P_i}{P_e} - 1 \right)^2 \right], \quad (6)$$

$$f(r_{ij}) = f_e (r_{1e}/r_{ij})^s, \quad (7)$$

式中, 下标 e 表示平衡状态, r_{1e} 是平衡状态下第一近邻的距离. 本文选用的平衡状态的电子密度为^[14]

$$f_e = ((E_c - E_{1f})/\Omega)^{3/5}, \quad (8)$$

式中 $\Omega = a^3/4$ 为面心立方 (FCC) 金属中每个原子所占的体积.

(4)–(6) 式中的参数 n , F_0 , α , k_0 , k_1 , k_2 和 k_3 可根据所考虑 FCC 金属的结合能 E_c 、单空位形成能 E_{1f} 、晶格常数 a 及弹性常数 C_{11} , C_{12} 和 C_{44} 分别由下列各式求得:

$$n = \sqrt{\frac{\Omega(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{216E_{1f}C_{44}}}, \quad (9)$$

$$F_0 = E_c - E_{1f}, \quad (10)$$

$$\alpha = \frac{1}{32} \Omega (C_{12} - C_{44}) - \frac{1}{8} n^2 F_0, \quad (11)$$

$$k_0 = -\frac{1}{9} E_{1f} - \frac{1}{42840} \Omega (5481 C_{44} + 2989 C_{12} - 2989 C_{11}), \quad (12)$$

$$k_1 = \frac{1}{9520} \Omega (1311 C_{44} + 939 C_{12} - 939 C_{11}), \quad (13)$$

$$k_2 = \frac{1}{1020} \Omega (-33 C_{44} - 32 C_{12} + 32 C_{11}), \quad (14)$$

$$k_3 = \frac{8}{5355} \Omega (9 C_{44} + C_{12} - C_{11}). \quad (15)$$

根据张邦维等^[11]的分析, (5) 式表示的相互作用势 $\phi(r_{ij})$ 只适用于原子间距小于第二近邻 r_{2e} 的情况, 对于距离大于 r_{2e} 时, 可使用一个三次条样函数作为截尾函数,

$$\phi(r_{ij}) = l_0 + l_1 \left(\frac{r_{ij}}{r_{2e}} - 1 \right) + l_2 \left(\frac{r_{ij}}{r_{2e}} - 1 \right)^2 + l_3 \left(\frac{r_{ij}}{r_{2e}} - 1 \right)^3 \quad (r_{2e} < r_{ij} \leq r_c) \quad (16)$$

式中参数 l_0 , l_1 , l_2 , l_3 和截尾距离 r_c 分别为

$$l_0 = k_0 + k_1 s^2 + k_2 s^4 + k_3 s^{-12}, \quad (17)$$

$$l_1 = 2k_1 s^2 + 4k_2 s^4 - 12k_3 s^{-12}, \quad (18)$$

$$l_2 = -\frac{2l_1}{\gamma - 1} - \frac{3l_0}{(\gamma - 1)^2}, \quad (19)$$

$$l_3 = \frac{l_1}{(\gamma - 1)^2} + \frac{2l_0}{(\gamma - 1)^3}, \quad (20)$$

$$r_c = r_{2e} + 0.75(r_{3e} - r_{2e}). \quad (21)$$

这里, r_{2e} 和 r_{3e} 分别为平衡状态下第二近邻和第三近邻的距离,

$$s = r_{2e}/r_{1e},$$

$$\gamma = r_c/r_{2e}.$$

有关 Pt 的输入参数^[10, 26, 27]和 MAEAM 模型参数分别列在表 1 和表 2 中.

表 1 Pt 的输入参数

| a/nm | E_c/eV | E_{1f}/eV | $C_{11}/\text{eV} \cdot \text{nm}^{-3}$ | $C_{12}/\text{eV} \cdot \text{nm}^{-3}$ | $C_{44}/\text{eV} \cdot \text{nm}^{-3}$ |
|---------------|-----------------|--------------------|---|---|---|
| 0.39239 | 5.84 | 1.20 | 2120 | 1720 | 520 |

表 2 Pt 的 MAEAM 模型参数

| n | F_0/eV | α | f_e | k_0/eV | k_1/eV | k_2/eV | k_3/eV | l_0/eV | l_1/eV | l_2/eV | l_3/eV |
|--------|-----------------|----------|--------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 0.4992 | 4.64 | 0.4219 | 0.9426 | -0.7167 | 0.4857 | -0.0646 | 0.0966 | -0.0021 | 0.8916 | -10.3626 | 30.5249 |

3. Pt(110)表面自吸附原子的能量和法向力

对吸附在金属表面的单个原子(看作原子 i , 且为了方便在以下公式中略去下标 i), 其能量可以表示为

$$E = F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_j \phi(r_j) + M(P), \quad (22)$$

$$\rho = \sum_j f(r_j), \quad (23)$$

$$P = \sum_j f^2(r_j). \quad (24)$$

这里 \sum_j 表示对金属表面的原子求和.

表面对吸附原子作用力的 $\alpha (= x, y, z)$ 分量可用下式计算:

$$\begin{aligned} f^\alpha = & - \frac{\partial E}{\partial r_j^\alpha} = - F'(\rho) \sum_j f'(r_j) r_j^\alpha / r_j \\ & - \frac{1}{2} \sum_j \phi'(r_j) r_j^\alpha / r_j \\ & - 2M'(P) \sum_j f(r_j) f'(r_j) r_j^\alpha / r_j, \quad (25) \end{aligned}$$

式中 r_j^α 为表面原子 j 与吸附原子的距离 r_j 的 α 分量.

FCC 金属(110)表面上两层原子的排列如图 1 所示, 其中 $T, H, B1, B2, H1$ 和 $H2$ 表示 6 个特殊的吸附位置: T 表示第一层原子的顶位, H 表示第一层原子的二重对称洞位(亦即第二层原子的顶位), $B1$ 表示沿 $[\bar{1}10]$ 方向第一层原子的桥位(短桥), $B2$ 表示沿 $[001]$ 方向第一层原子的桥位(长桥), $H1$ 是一个第一层原子与相邻两个第二层原子间的非对称三重洞位, $H2$ 是两个第一层原子与相邻一个第二层原子间的非对称三重洞位.

考虑到(110)表面原子排列的周期性, 我们选取

表 3 吸附原子距 Pt(110)表面第一原子层的距离 z_{ad} 不同时, 吸附原子的能量和法向力的最大值 (E_{max}, F_{max}) 最小值 (E_{min}, F_{min}) 及对应表面第一层原子的位置

| z_{ad}/nm | 0.10 | 0.15 | 0.20 | 0.25 | 0.30 | 0.35 | 0.40 |
|--|---------------|---------------|--------------|---------------|-----------------|---------------|---------------|
| E_{max}/eV | 1005(T) | 73.5(T) | -2.4(T) | -3.3($B2$) | -2.7(H) | -2.3(H) | -2.0($B2$) |
| E_{min}/eV | -4.8(H) | -4.6(H) | -4.2($B1$) | -3.7(T) | -3.0($B1$) | -2.5(T) | -2.0(T) |
| $F_{max}/\text{eV}\cdot\text{nm}^{-1}$ | 120740(T) | 6283.1(T) | 134.9(T) | -11.3($B2$) | -10.0($B2$ 附近) | -6.4(H) | -5.5(H 附近) |
| $F_{min}/\text{eV}\cdot\text{nm}^{-1}$ | 20.1(H) | -9.9(H) | -14.3(H) | -14.4(H) | -13.1(T) | -10.7($B1$) | -7.4(T) |

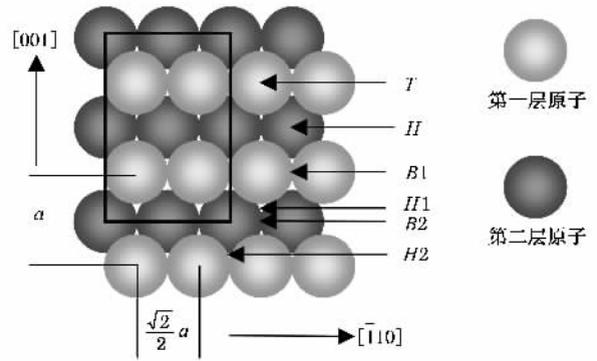


图 1 FCC 金属(110)表面原子的排列及其 6 个特殊位置

一个沿 $[\bar{1}10]$ (x) $[001]$ (y) $[110]$ (z) 方向分别为 $L_x = \frac{5\sqrt{2}}{2}a, L_y = 5a, L_z = 5\sqrt{2}a$ 的单元进行计算, 其中包括表面 20 层原子, 每层包括 25 个原子, 共 500 个原子.

为了得到 Pt 吸附原子在 Pt(110)表面的能量 E 和沿表面法线方向的作用力 F_n (简称法向力) 的全貌, 吸附原子最初被置于距表面第一层原子距离为 $z_{ad} = 0.10 \text{ nm}$ 的高度, 并且以 0.01 nm 的间隔分别沿 x 和 y 轴移动, 每移动一次计算出吸附原子的能量和法向力, 扫描的范围为 $\sqrt{2}a \times 2a$ (如图 1 方框区域). 然后吸附原子以 0.05 nm 的间隔沿 z 方向移动, 每移动一次重复上述扫描过程, 直到吸附原子距表面第一层原子的距离 $z_{ad} = 0.4 \text{ nm}$.

图 2 和图 3 分别为 Pt(110)表面自吸附原子在距表面第一原子层的距离为 $z_{ad} = 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35, 0.40 \text{ nm}$ 的吸附原子的能量 E 和法向力 F_n 的形貌图, 其观察方向为沿方位角 $\varphi = 15^\circ$ 和极角 $\psi = 60^\circ$. 图 2 和图 3 中能量和法向力的最大值和最小值以及它们所对应的(110)表面第一层原子的位置列于表 3 中.

从吸附原子的能量形貌(图 2)可以看出, 当吸

附原子距表面很近($z_{ad} = 0.10 \text{ nm}$)并位于表面第一

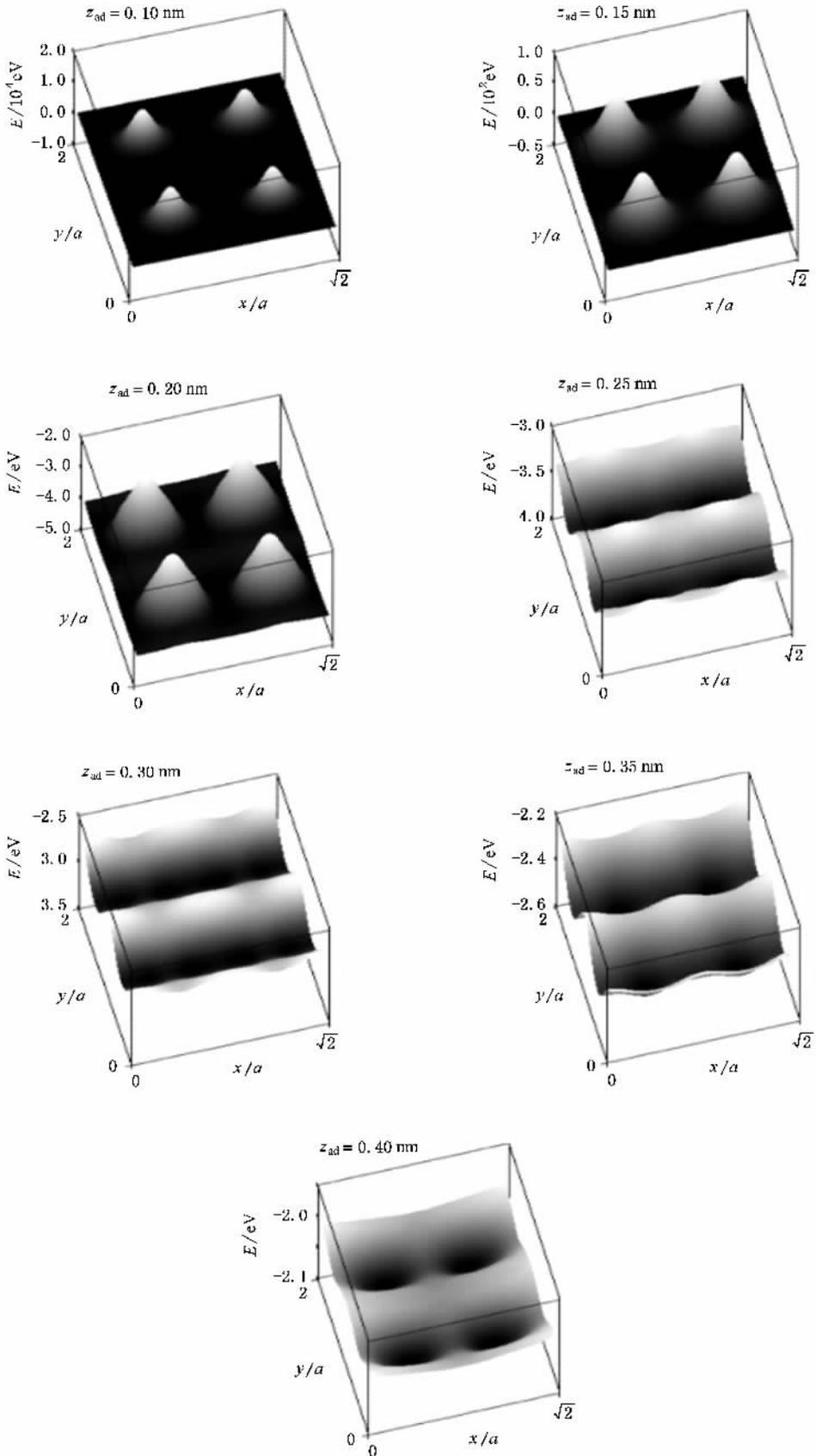


图2 P(110)表面自吸附原子距表面第一原子层分别为 $z_{ad} = 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35, 0.40$ nm 时的能量 E 形貌图

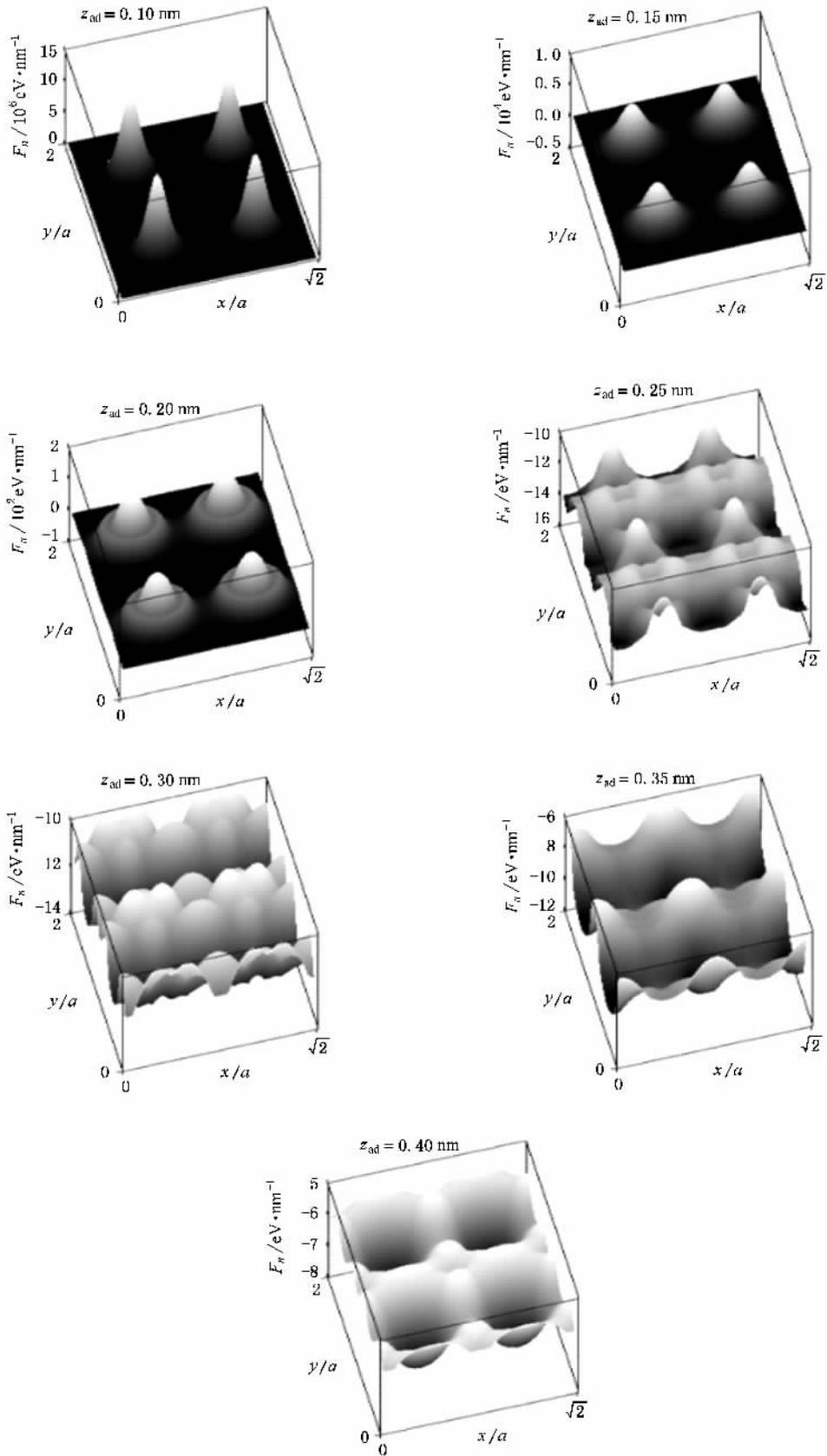


图3 P(110)表面自吸附原子距表面第一原子层分别为 $z_{ad} = 0.10$ 、 0.15 、 0.20 、 0.25 、 0.30 、 0.35 、 0.40 nm 时的法向力 F_n 形貌图

层原子的顶位 T 时, 吸附原子的能量很大, 当偏离顶位时能量迅速减小, 到二重对称洞位 H 时能量达到最小. 随着吸附原子与表面第一原子层间距离的增加 ($z_{\text{ad}} = 0.15, 0.20 \text{ nm}$), 对应顶位 T 上的最大能量值及其与对应于二重对称洞位 H ($z_{\text{ad}} = 0.15 \text{ nm}$) 和短桥位 $B1$ ($z_{\text{ad}} = 0.20 \text{ nm}$) 的最小能量差逐渐减小. 当吸附原子远离表面时 ($z_{\text{ad}} = 0.25, 0.30, 0.35, 0.40 \text{ nm}$) 吸附原子的能量均为负值, 但能量的最大值和最小值对应的位置分别为 $B2, H, H, B2$ 和 $T, B1, T, T$, 且能量的最大值与最小值之差随着距离的增加继续减小. 从图 2 还可以看出, 吸附原子的能量沿密排方向 $\bar{1}10$ 的变化幅度明显小于沿 001 方向的变化幅度.

为了详细分析吸附原子在表面上能量的变化趋势、最小值以及稳定的吸附位置, 图 4 给出了吸附原子位于 6 个特殊位置时能量随吸附原子与表面第一

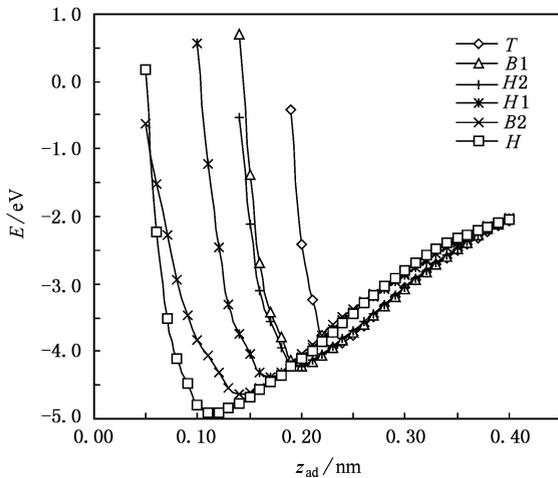


图 4 Pt 吸附原子在 Pt(110) 表面 6 个特殊位置的能量 E 随吸附原子与表面第一原子层距离 z_{ad} 的变化

原子层间距离的变化曲线. 从图 4 可以看出 (1) 随着吸附原子远离表面, 对应 6 个特殊位置的能量都是先迅速减小到最小值后再慢慢增加, 但最小值及其所对应的吸附原子与表面第一原子层间的距离 z_{ad} (见表 4) 按 $T, H2, B1, H1, B2, H$ 的次序依次减小. 因此当吸附原子位于第一层原子的二重对称洞位上 0.11 nm 时最稳定. (2) 随着吸附原子与表面第一原子层间距离的继续增加 ($z_{\text{ad}} > 0.40 \text{ nm}$), 6 条能量曲线相互靠近然后合并为一条曲线而最终趋近于零. (3) 比较吸附原子从一个洞位上迁移到相邻的另一个洞位上三种可能的路径 ($H \rightarrow T \rightarrow H, H \rightarrow B1 \rightarrow$

$H, H \rightarrow B2 \rightarrow H$) 所对应的迁移能量 ($0.98, 0.71, 0.28 \text{ eV}$) 和距离 ($\frac{\sqrt{6}}{2}a, a, \frac{\sqrt{2}}{2}a$) 可知其最佳迁移路径为 $H \rightarrow B2 \rightarrow H$.

表 4 Pt 吸附原子在 Pt(110) 表面 6 个特殊位置对应的最小能量 E_{min} 及与表面第一原子层间的距离 z_{ad}

| 位置 | T | $H2$ | $B1$ | $H1$ | $B2$ | H |
|----------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| E_{min}/eV | -3.94 | -4.21 | -4.22 | -4.37 | -4.64 | -4.92 |
| z_{ad}/nm | 0.23 | 0.20 | 0.20 | 0.17 | 0.14 | 0.11 |

根据表面对吸附原子法向力 F_n 随吸附原子与表面第一原子层间距的变化, 可以分为三个区域: 排斥区、过渡区、吸引区. (1) 排斥区 ($z_{\text{ad}} = 0.10 \text{ nm}$), 当吸附原子距表面很近时法向力均为正值, 表明吸附原子受到表面排斥力的作用, 最大排斥力出现在第一层原子的顶位 T 并且非常大, 从顶位向周围区域延伸排斥力迅速减小, 最小值出现在第一层原子的二重对称洞位 H . (2) 过渡区 ($z_{\text{ad}} = 0.15, 0.20 \text{ nm}$), 吸附原子受到的法向力在顶位及其附近时为排斥力, 而在其他区域为吸引力. 与排斥区相似, 法向力的最大值和最小值也分别出现在第一层原子的顶上和二重对称洞位上. 在排斥和过渡两个区域, 由于吸附原子距表面较近, 原子间的对势相互作用比多体相互作用大得多, 所以能量和法向力的形貌图直观地反映了表面第一层原子排列的形貌, 这与 Komiyama 等^[6]利用对势理论得出的结果一致. (3) 吸引区 ($z_{\text{ad}} = 0.25, 0.30, 0.35, 0.40 \text{ nm}$), 吸附原子受到的法向力均为负值, 但力的形貌图较前两个区域更为复杂, 这主要是由于多体相互作用及电子密度的非球型对称分布所致.

4. 结 论

采用 MAEAM 计算了 Pt(110) 表面自吸附原子的能量和所受的力, 得到以下结论.

(1) Pt 吸附原子在 Pt(110) 表面第一层原子的二重对称洞位上 0.11 nm 时能量最小, 为 -4.92 eV , 在此位置吸附原子最稳定.

(2) Pt 吸附原子在 Pt(110) 表面上迁移的最佳路径是由一个二重对称洞位沿密排方向迁移到最近的另一个二重对称洞位, 迁移能最低, 为 0.28 eV .

(3) 根据 Pt(110) 表面对吸附原子作用力的性

质,在吸附原子远离表面的过程中依次经过三个区域:排斥区、过渡区、吸引区。

(4)在排斥区和过渡区,吸附原子的能量和所受的法向力形象地反映了(110)表面第一层原子的排列特征,这主要是由于吸附原子与表面原子间的

对势相互作用所致。

(5)在吸引区,由于多体相互作用及晶体中原子电子密度的非球型对称分布的影响,使吸附原子的能量和所受的法向力表现出比在排斥区和过渡区更为复杂的特性。

- [1] Kellogg G, Feibelman P J 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 3143
- [2] Leiva E P M, Del Pópolo M G, Schmickler W 2000 *Chem. Phys. Lett.* **320** 393
- [3] Ohnesorge F, Binnig G 1993 *Science* **260** 1451
- [4] Cai J Q, Tao X M, Cheng W B *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5350 (in Chinese)[蔡建秋、陶向明、陈文斌等 2005 物理学报 **54** 5350]
- [5] Li H H, Li Y D, Wang C K 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1239 (in Chinese)[李红海、李英德、王传奎 2002 物理学报 **51** 1239]
- [6] Komiyama M, Tsujimichi K, Ohkubo S *et al* 1995 *Jpn. J. Appl. Phys.* **34** 789
- [7] Katagiri M, Kubo M, Tsujimichi K *et al* 1996 *Surf. Sci.* **357—358** 900
- [8] Daw M S, Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [9] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [10] Baskes M I 1992 *Phys. Rev. B* **46** 2727
- [11] Zhang B W, Ouyang Y F 1993 *Phys. Rev. B* **48** 3022
- [12] Zhang B W, Ouyang Y F, Liao S Z *et al* 1999 *Phys. B* **26** 218
- [13] Hu W Y, Zhang B W, Huang B Y *et al* 2001 *J. Phys: Condens. Matter* **13** 1193
- [14] Hu W Y, Zhang B W, Shu X L *et al* 1999 *J. Alloys Comp.* **287** 159
- [15] Zhang J M, Xu K W, Ma F 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1993 (in Chinese)[张建民、徐可为、马飞 2003 物理学报 **52** 1993]
- [16] Zhang J M, Ma F, Xu K W 2003 *Surf. Interf. Anal.* **35** 662
- [17] Zhang J M, Ma F, Xu K W 2003 *Surf. Interf. Anal.* **35** 805
- [18] Zhang J M, Wei X M, Xin H 2004 *Surf. Interf. Anal.* **36** 1500
- [19] Zhang J M, Wei X M, Xin H 2005 *Appl. Surf. Sci.* **243** 1
- [20] Zhang J M, Wei X M, Xin H *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 1015
- [21] Ma F, Zhang J M, Xu K W 2003 *Surf. Interf. Anal.* **36** 355
- [22] Zhang J M, Xin H, Wei X M 2005 *Appl. Surf. Sci.* **246** 14
- [23] Xin H, Zhang J M, Wei X M *et al* 2005 *Surf. Interf. Anal.* **37** 608
- [24] Bassett D W, Webber P R 1978 *Surf. Sci.* **70** 520
- [25] Freyer N, Bonzel H P 1985 *Surf. Sci.* **160** L501
- [26] Barrett C S, Massalski T B 1980 *Structure of Metals* (3rd ed) (Oxford: Pergamon Press)
- [27] Gray D E 1972 *American Institute of Physics Handbook* (3rd ed) (New York: McGraw-Hill Press)

Analysis of energy and force of self-adatom on Pt(110) surface by modified analytical embedded-atom method^{*}

Shu Yu¹⁾ Zhang Jian-Min^{1)†} Xu Ke-Wei²⁾

¹⁾ College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

²⁾ State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 10 August 2005; revised manuscript received 20 March 2006)

Abstract

The energy and normal force of self-adatom on Pt(110) surface have been calculated by the modified analytical embedded atom method. The most stable position for a Pt adatom on Pt(110) surface is 0.11 nm above the hollow of the first layer atoms, and the best path for a Pt adatom migrating from a hollow to neighbor hollow is along the close-packed direction. On leaving the surface, the adatom will go through the repulsive, transitional and attractive regions, successively. In the repulsive and transitional regions, due to stronger pair interaction potential between adatom and the first layer atoms, the contour maps of the energy and normal force could be seen simply as a duplicate of the Pt(110) surface. This is consistent with the results of pair potential theory and embedded atom method. The complicated contour maps of the energy and normal force were obtained in the attractive region due to relatively increasing effects of the many-body interactions and nonspherical distribution of the electrons of the atoms in the crystal.

Keywords: metal surface, self-adsorption, energy, force

PACC: 3450D, 6770, 6810J, 8265M

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2004CB619302) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50271038).

[†] E-mail: jianm_zhang@yahoo.com