

Al 表面的多层弛豫

——修正嵌入原子势的应用*

申三国 万 钧 范希庆

(郑州大学物理工程学院, 郑州 450052)

(1996 年 11 月 22 日收到)

利用修正的嵌入原子方法计算了 Al 低指数面(100), (110), (111)和高指数面(210), (211), (310), (311), (331)的多层弛豫, 所得到的结果都与实验及第一原理计算结果符合得很好. 尤其是这种半经验方法给出了与实验结果相符的 Al(100)和(111)表面最外层向外膨胀的理论结果, 并提出这种膨胀主要是由于最外层与第二层的键中 s 态电子增加而 p 态电子减少引起的.

PACC: 6820

1 引 言

第一原理计算和半经验方法是计算机模拟金属、半导体的结构和性质的两种主要方法. 随着计算机技术的发展和数值方法的改进, 这两种方法越来越成为研究固体材料性质的有用工具. 第一原理计算一般是可靠的, 但这种方法通常限于 200 个原子的体系. 半经验方法允许处理几千个原子体系, 但其可靠性有时会成问题. 原子间相互作用势始终是半经验方法成功的关键. 多年来采用的对势相互作用, 由于得不到可靠的几何结构和材料的稳定性, 从而使这些研究的结论令人可疑. 近年来, Daw 和 Baskes^[1]基于局域电子密度理论提出用嵌入原子法(EAM)描述金属、半导体中原子相互作用, 并在模拟满(或近满)壳层的过渡金属物理性质中获得成功, 例如对 Cu, Ni 等. 但在 EAM 中由于假定电子密度是球对称的, 其适用范围受到一定的限制. 为此, Baskes 等^[2,3]修正了电子密度的表达式, 使电子密度包括了对角度的依赖, 并将其称作修正的嵌入原子法(MEAM). 这种方法已推广到周期表中的 44 个元素, 并把它应用于对一些材料的点缺陷、原子簇和表面的研究, 并获得试探性成功.

本文用 MEAM 研究了 Al 的低指数面(100), (110), (111)和高指数面(210), (331)等表面的多层弛豫, 所得到的弛豫大小和花样都在低能电子衍射(LEED)实验误差范围之内, 并且与现有的第一原理结果符合得很好. 特别是描述了 Al(100)和(111)面的第一层向外膨胀的实验事实.

* 河南省自然科学基金资助的课题.

2 MEAM 的基本公式

在 MEAM 中, 原子体系的总能量 E , 其形式与通常的 EAM 相同,

$$E = \sum_i E_i, \quad (1)$$

$$E_i = F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} \phi_{ij}(R_{ij}), \quad (2)$$

式中 i, j 求和遍及晶体中的所有原子, $F_i(\bar{\rho}_i)$ 是将一个原子嵌入背景电荷密度为 $\bar{\rho}_i$ 的 i 格点所需的能量, ϕ_{ij} 是相距为 R_{ij} 的 i 和 j 原子之间对相互作用势。

在最近邻近似下, 用配位数 Z_i 来归一化背景电荷密度会带来很多方便, 这样, (2) 式可写作

$$E_i = F_i(\bar{\rho}_i/Z_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} \phi_{ij}(R_{ij}). \quad (3)$$

考虑一个单质的参考晶体, 相互作用限制在最近邻的情况下, 每个原子对总能量 E 的贡献为

$$E_i^*(R) = F_i(\bar{\rho}_i^0(R)/Z_i) + \frac{Z_i}{2} \phi_{ii}(R), \quad (4)$$

式中 $\bar{\rho}_i^0(R)$ 是参考晶体的背景电子密度, R 是最近邻间距. 假定参考晶体的 E_i^* 由普适的能量函数^[4]给出

$$E_i^*(R) = -E_i^0 \left[1 + \alpha_i \left(\frac{R}{R_i^0} - 1 \right) \right] \exp \left[-\alpha_i \left(\frac{R}{R_i^0} - 1 \right) \right], \quad (5)$$

式中 R_i^0 是平衡条件下的最近邻原子间距, $\alpha_i = \sqrt{9B\Omega/E_i^0}$, B 是体弹性模量, Ω 是原子体积. 由 (4) 式可确定原子间的对势

$$\phi_{ii} = \frac{2}{Z_i} [E_i^*(R) - F_i(\bar{\rho}_i^0(R)/Z_i)]. \quad (6)$$

利用 (6) 式可将 (2) 式改写为

$$E_i = \frac{1}{Z_i} \sum_{j(\neq i)} E_i^*(R_{ij}) + [F_i(\bar{\rho}_i/Z_i) - \frac{1}{Z_i} \sum_{j(\neq i)} F_i(\bar{\rho}_i^0(R_{ij})/Z_i)]. \quad (7)$$

(7) 式适合于任一组态下的第 i 个原子对体系总能量的贡献. (7) 式等号右端第二项可看作一个新类型的嵌入能, 它代表原子 i 在背景电荷密度 $\bar{\rho}_i$ 中的嵌入能和该原子在参考晶体中的平均嵌入能之差.

在 EAM 中, 背景电荷密度 $\bar{\rho}_i$ 取作原子的电子密度球形平均的线性叠加, 所以背景电荷密度 $\bar{\rho}_i$ 只与径向有关, 而与方位无关. 在 MEAM 中, 背景电荷密度 $\bar{\rho}_i$ 的表达式不仅是径向函数, 而且还是键方向的函数. 在格点 i 处的电子密度的主要部分为

$$\rho_i^{(0)} = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^{a(0)}(R_{ij}), \quad (8)$$

式中 $\rho_j^{a(0)}(R_{ij})$ 是与第 i 个原子相距 R_{ij} 的第 j 个原子的电子密度, 与键方向无关. 把 $\bar{\rho}_i$

的角度相关的部分当作对背景密度 ρ_i^0 的微扰, 为避免引入对电荷密度求导的奇异性, 取背景密度为四项密度平方加权之和, 即

$$(\bar{\rho}_i)^2 = \sum_{l=0}^3 t_i^{(l)} (\rho_i^{(l)})^2, \quad (9)$$

式中 $t_i^{(l)}$ 是第 l 项贡献的权重. 取 $t_i^{(0)} = 1$, 式中第 $l=0$ 项即为 (8) 式的平方. $l=1, 2$ 和 3 的项是依赖于第 i 个原子的近邻相对位置, 分别由下式给出:

$$(\rho_i^{(1)})^2 = \sum_{\alpha} \left[\sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} \rho_j^{\alpha(1)}(\mathbf{R}_{ij}) \right]^2, \quad (10)$$

$$(\rho_i^{(2)})^2 = \sum_{\alpha, \beta} \left[\sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\beta} \rho_j^{\alpha\beta(2)}(\mathbf{R}_{ij}) \right]^2 - \frac{1}{3} \left[\sum_{j(\neq i)} \rho_j^{\alpha(2)}(\mathbf{R}_{ij}) \right]^2, \quad (11)$$

$$(\rho_i^{(3)})^2 = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\sum_{j(\neq i)} x_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\beta} x_{ij}^{\gamma} \rho_j^{\alpha\beta\gamma(3)}(\mathbf{R}_{ij}) \right]^2, \quad (12)$$

式中 $x_{ij}^{\alpha} = R_{ij}^{\alpha} / R_{ij}$, R_{ij}^{α} 是第 i 个原子指向第 j 个原子位矢的 α 分量. 容易证明, (10—12) 式分别依赖于原子 j, i 和 k 之间的角度 θ_{jik} 余弦的一次方、二次方和三次方. 亦即在 MEAM 中包括了多体相互作用. 这里的 $\rho_i^{\alpha(l)}(\mathbf{R}_{ij})$ 代表 j 原子在 i 格点处的电子密度, 取作指数形式

$$\rho_i^{\alpha(l)}(R) = \exp[-\beta_i^{(l)}(R/R_i^0 - 1)], \quad (13)$$

式中 $\beta_i^{(l)} (l=1, 2, 3)$ 是待定参数. 嵌入函数取为电子密度的简单函数

$$F_i(\rho) = A_i E_i^0 \rho \ln(\rho), \quad (14)$$

式中 A_i 是调整参数, E_i^0 是内聚能. 这种形式的嵌入函数已被证明^[3]能给出键长与能量之间正确的坐标依赖关系.

在 MEAM 的形式理论中, 除 $t^0 = 1$ 外, 还包括 11 个待定参数, $E_i^0, R_i^0, \alpha_i, A_i, \beta_i^{(l)} (l=0, 1, 2, 3), t_i^{(l)} (l=1, 2, 3)$. 对于 Al 晶体, 这些参数已由该晶体的物理常数定出 (见文献 [3] 的表 3). 下面用这种方法确立的对势 ϕ_{ii} 和嵌入函数 $F_i(\rho)$ 来描述 Al 表面的多层弛豫. 我们用 10 层的薄板模拟半无限晶体. 为保持平行于表面的周期性, 每层包括 15×15 个原子. 从表面算起的第九和第十层固定不动, 允许前 8 层在垂直表面的方向上弛豫. 用单纯形方法求得体系能量最小值, 由此定出弛豫表面能与其相匹配的层与层之间的面间距 d_{ij} . i 和 j 层之间的层间距相对理想表面层间距 d_{ij}^0 变化的百分比为

$$\Delta d_{ij} = 100[(d_{ij} - d_{ij}^0)/d_{ij}^0] \%. \quad (15)$$

3 计算结果

用上述 MEAM 算得 Al 的低指数面和高指数面弛豫后面间距的变化分别列于表 1 和表 2 中. 首先让我们将 Al(110) 表面的 MEAM 结果同实验和其他理论结果进行比较. 多组实验表明, Al(110) 表面弛豫遵从一般金属的规律, 即前两层的间距 d_{12} 收缩. 早期的实验^[5]估计 Al(110) 的 Δd_{12} 收缩 10%, 最近的实验^[6-8]估计收缩 8.5%. 我们的结果预

表 1 Al 的低指数表面面间距变化的百分数(%)

Al 表面	实 验					理 论				
	Δd_{12}	Δd_{23}	Δd_{34}	Δd_{45}	数据来源	Δd_{12}	Δd_{23}	Δd_{34}	Δd_{45}	数据来源
(100)	1.8				文献[9]	0.79	0.06	0.01	0.00	本文
						1.2	0.2	-0.1		文献[19]
						0.7	0.2	0.4		文献[20]
						-4.8	2.3			文献[21]
						-4.9	-2.24	-2.25	-2.4	文献[22]
						-3.0				文献[23]
(110)	-10.0 -8.4 4.9 -1.6 -8.6±0.8 5.0±1.1 -1.6±1.2 1.0±1.3 -8.5±1.0 5.5±1.1 2.2±1.3				文献[5] 文献[6] 文献[7] 文献[8]	-9.64	2.71	4.30	-2.76	本文
						-9.1	1.3			文献[21]
						-10.0	4.0	-3.0		文献[24]
						-6.8	3.5	-2.0		文献[25]
						-5.35	1.15	-3.04		文献[20]
						-10.47	3.64	-2.93	-1.4	文献[22]
						-10.4	3.14	-2.75	1.4	文献[26]
						-7.0				文献[23]
(111)	5.0 -5.0 -8.1 2.2 0.9±0.5 1.7±0.3 0.5±0.7				文献[10] 文献[11] 文献[12] 文献[13] 文献[14] 文献[15]	2.73	0.25	0.02	0.00	本文
						1.0				文献[27]
						0.5				文献[28]
						-3.26	-1.70	-1.76	-1.8	文献[22]
						-3.9	2.1			文献[21]

1) $\Delta d_{ij}<0$ 表示收缩, $\Delta d_{ij}>0$ 表示膨胀.

表 2 Al 的高指数表面面间距变化的百分数(%)

Al 表面	实 验					理 论				
	Δd_{12}	Δd_{23}	Δd_{34}	Δd_{45}	数据来源	Δd_{12}	Δd_{23}	Δd_{34}	Δd_{45}	数据来源
(210)	-15.5±2.4	-0.8±2.9	8.9±2.6	-4.4±3.6	文献[16]	-16.9	-7.39	12.18	-3.93	本文
						-27.7	-10.2	25.9	-12.8	文献[24]
(331)	-11.7±2.3	-4.1±3.1	10.23±3.1	-4.8±4.1	文献[17]	-8.90	-3.10	7.27	-2.46	本文
						-4.84	-9.27	1.42		文献[21]
(311)	-13.3±1	8.8±1.5			文献[18]	-15.79	6.50	3.07	-3.18	本文
						-9.51	0.2	-3.09	3.95	文献[21]
(211)						-9.08	-10.63	11.52	1.67	本文
						-7.73	-4.55	-1.62	-4.86	文献[21]
(310)						-7.44	-11.22	-2.38	7.67	本文
						-7.25	-5.05	-9.08	1.87	文献[21]

1) $\Delta d_{ij}<0$ 表示收缩, $\Delta d_{ij}>0$ 表示膨胀.

言 Δd_{12} 收缩 9.64%, 伴随着 Δd_{23} 的 2.71% 的膨胀, 与实验和其他理论^[20—26] 符合得很好。

近年来的实验和理论都确认 Al(100) 和 Al(111) 表面的多层弛豫不遵从前面所述的一般金属的共同规律. Davis 等^[2] 的实验报告 Al(100) Δd_{12} 膨胀 1.8%, Bohnen 等^[19] 的第一原理计算给出 Δd_{12} 膨胀 1.2%, Δd_{23} 也是伴随着膨胀. 本文的 MEAM 预言 Al(100) Δd_{12} 膨胀 0.79%, Δd_{23} 膨胀 0.06%. 显然, 这同实验和第一原理的计算是相符的, 尤其是预言了 $\Delta d_{12} > 0$. 对 Al(111) 表面, 虽然早期的一些实验^[11,12] 和半经验理论(嵌入原子法^[22], 等价晶体理论(ECT)^[21] 等)都预言 Δd_{12} 收缩, 但最近的实验和第一原理计算已确认 Al(111) 面的 Δd_{12} 是膨胀的. Noonan 和 Davis^[15] 的实验预言 Al(111) 面的 $\Delta d_{12} = 1.7\% \pm 0.3\%$, $\Delta d_{23} = 0.5\% \pm 0.7\%$. Needs^[27] 第一原理计算预言 Δd_{12} 膨胀 1.0%. 我们的结果 $\Delta d_{12} > 0$, 而且弛豫大小可与实验值相比拟。

高指数面的面间距小, 表面比较开放, 所以涉及的弛豫层数比较多, 一般不存在收缩和膨胀交替的花样. Adams 等^[17] 的 LEED 分析显示 Al(331) 面的 $- - + -$ 的弛豫花样, 本文的结果重现了这种花样, 但各层的弛豫量比实验值系统的偏小(见表 2). 对 Al(311) 面, 我们算得的 $\Delta d_{12} = 15.79\%$, $\Delta d_{23} = 6.5\%$. 比等价晶体理论^[21] 的结果更接近实验值. 我们计算的 Al(210) 表面的多层弛豫, 其大小和符号都与实验相近, 比 Barnett 等^[24] 赝势方法的计算结果还要好。

此外, 我们给出了 MEAM 对 Al(211) 和 (310) 表面多层弛豫的预言, 同等价晶体理论^[21] 相比较, MEAM 预言的弛豫量偏大, 这有待实验来检验。

4 讨论和结论

金属表面弛豫的一般规律是第一层间距收缩, 伴随着深层间距的阻尼振荡弛豫, 比较开放的表面收缩较大, 弛豫扩展也比较深. Feibelman^[29] 总结了物理的和化学的观点对最外层收缩的定性解释: (1) 抹平平行于表面的电荷密度, 减小电子动能, 导致负电荷向里移动, 从而吸引离子向里移动; (2) 基于有效介质理论, 丢失电荷密度的表面原子, 趋向于往优化电荷密度方向运动; (3) 由于表面原子失去近邻, 引起价电子背向成键, 导致表面原子向里收缩. 结果分析表明, 大多数金属表面都遵从这些简单的解释. 只有少数金属例外, 典型的是密堆积表面, 它们的外层原子丢失的近邻相对较少, 以及在理想的情况下表面的电荷密度就比较平滑. 所以, 对这些表面原子由于丢失近邻原子而引起的背向成键强度或静电力收缩最外层的能力都应该是相当小的. 因此这些密堆积表面弛豫的符号和大小应与表面电子结构的细节相关. Al(111) 和 (100) 表面最外层向外膨胀就属于这种情况。

为对 Al(111) 和 (100) 表面最外层向外弛豫作较深入的理解, 我们计算了 Al(100), (110) 和 (111) 表面弛豫前后前 5 层原子中心处的电荷密度变化以及与其相匹配的各层能量变化. 表 3 中的结果表明: (1) 伴随 Al(100) 和 (111) 表面最外层的膨胀, 前 5 层每层的原子中心的电荷密度都有减少. 这同 Feibelman^[29] 的第一原理计算得到的 Be(0001) 表面弛豫后前 5 层每层糕模(muffin tins)中的积分电荷密度都减小相类似. 由此推测, Al(100)

和(110)表面最外层的膨胀机理与 Be(0001)最外层向外膨胀的机理相同,主要是在弛豫过程中第一与第二层键中的 p 态电子减少,s 态电子增加,从而导致第一与第二层的原子轨道间的重叠被减弱,于是 Al(100)和(111)外层膨胀, $\Delta d_{12}>0$.说明 Al(100)和(111)表面最外层的膨胀不能用前面所述的背向键增强来解释.(2)Al(110)表面收缩伴随着前两层上原子中心处的电荷密度的增加(第三、第四和第五层上原子中心处的电荷密度有增有减).这种行为意味着第一层与第二层之间的原子轨道重叠被增强.这表明 Al(110)表面最外层收缩是可用背向键增强来解释的.(3)Al(100),(111)和(110)表面弛豫能在 10^{-3} eV 数量级,而且同表面弛豫大小是匹配的,弛豫大表面弛豫能 ΔE (各层弛豫能之和)也大.

表 3 弛豫前后表面附近各层原子格点处的电荷密度 ρ 、能量 E 及变化量¹⁾

(100)	1	2	3	4	5
ρ_0	0.7832	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
ρ_1	0.7791	0.9969	0.9998	1.0000	1.0000
$\Delta \rho$	-0.0041	-0.0031	-0.0002	0.0000	0.0000
$\Delta d_{ij}/\%$	0.791	0.060	0.004	0.000	0.000
E_0	-3.1197	-3.5800	-3.5800	-3.5800	-3.5800
E_1	-3.1203	-3.5798	-3.5799	-3.5800	-3.5800
ΔE	-0.0006	+0.0002	+0.0001	0.0000	0.0000
(111)	1	2	3	4	5
ρ_0	0.8209	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
ρ_1	0.8052	0.9892	0.9990	0.9999	0.9999
$\Delta \rho$	-0.0157	-0.0108	-0.0010	0.0001	0.0001
$\Delta d_{ij}/\%$	2.726	0.245	0.225	0.002	0.000
E_0	-3.3055	-3.5800	-3.5800	-3.5800	-3.5800
E_1	-3.3130	-3.5774	-3.5799	-3.5800	-3.5800
ΔE	-0.0075	+0.0026	+0.0001	0.0000	0.0000
(110)	1	2	3	4	5
ρ_0	0.7433	0.9345	1.0000	1.0000	1.0000
ρ_1	0.7674	0.9370	0.9916	0.9924	1.0005
$\Delta \rho$	0.0241	0.0025	-0.0084	-0.0076	0.0005
$\Delta d_{ij}/\%$	-9.629	2.711	4.292	-2.748	1.109
E_0	-2.9329	-3.5241	-3.5800	-3.5800	-3.5800
E_1	-2.9501	-3.5307	-3.5776	-3.5756	-3.5794
ΔE	-0.0172	-0.0066	+0.0024	+0.0044	+0.0006

1)下标 0 和 1 分别表示弛豫前后的结果.能量以 eV 为单位.

表 1 和表 2 中的 MEAM 结果表明,MEAM 确定的 Al 的嵌入函数和势能既能很好地描述 Al 的低指数面的弛豫,又能描述高指数面的弛豫;不仅能正确地描述(100)和(111)

表面最外层的膨胀,又能描述其他面的收缩以及多层弛豫花样.经典的原子间的势(Morse, Lennard-Jones 势等)一般得到 Δd_{12} 膨胀^[30].而一般的半经验的势,如 ECT 和 EAM 等总是预言最外层是收缩, $\Delta d_{12} < 0$, 如表 1 和表 2 所列出的其他理论值.除非对半经验的对势作针对性的设计,例如,Chen^[31]在他的 EAM 中,对势取作 Morse 势可以描述 Be(0001)的 $\Delta d_{12} > 0$ 的行为,但用同样的方法描述 Al(111)表面的弛豫,却给出与实验相反的结果, $\Delta d_{12} < 0$. MEAM 所确立的 Al 的对势 ϕ 和嵌入函数 F 能同时重现 Al 的不同表面的最外层的膨胀或收缩,这只能说明在 MEAM 中,隐藏着原子间的相互作用同环境相关性,即原子间的相互作用随环境变化而变化.从(6)式可以看出这种环境相关性是通过以背景电子密度 $\bar{\rho}_i$ 为宗量的嵌入函数引进的,而 $\bar{\rho}_i$ 又包括多体相互作用.显然,Al 的不同表面上的原子的配位数和电子密度是不同的,而 MEAM 中包含着原子间相互作用对环境的依赖,从而正确描述了不同表面最外层的膨胀或收缩.

通过用 MEAM 所确立的 Al 的嵌入函数和对势,模拟 Al 低指数面与高指数面的多层弛豫所取得的成功,我们认为,用 MEAM 研究其他金属表面的弛豫也可能获取同第一原理相比拟或相接近的结果.但正如 Baskes 所提醒的那样,在文献[3]中所给出的参数仅是建立一个原子级的计算框架,在详细地研究具体材料之前,还需对他所给出的参数作进一步的调整.

- [1] M.S.Daw and M.I.Baskes, *Phys. Rev.*, **B29**(1984),6443; *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983),1285.
- [2] M.I.Baskes, J.S.Nelson and A.F.Wright, *Phys. Rev.*, **B40**(1989),6085.
- [3] M.I.Baskes, *Phys. Rev.*, **B46**(1992),2727.
- [4] J.H.Rose, J.R.Smith, F.Guinea *et al.*, *Phys. Rev.*, **B29**(1984),2963.
- [5] M.R.Martin and G.A.Somorjai, *Phys. Rev.*, **B7**(1973),3607.
- [6] H.B.Nielsen, J.N.Anderson, L.Petersen *et al.*, *J. Phys. C*, **15**(1982),L1113.
- [7] J.N.Anderson, H.B.Nielsen, L.Petersen *et al.*, *J. Phys. C*, **17**(1984),173.
- [8] J.R.Noonan and H.L.Davis, *Phys. Rev.*, **B29**(1984),4349.
- [9] H.L.Davis, J.B.Hannon, K.B.Ray *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992),2632.
- [10] G.E.Laramore and C.B.Duke, *Phys. Rev.*, **B5**(1972),267.
- [11] D.W.Jepsen, P.M.Marcus and F.Jona, *Phys. Rev.*, **B8**(1973),5523.
- [12] A.Bianconi and R.Z.Bachrach, *Phys. Rev. Lett.*, **42**(1979),104.
- [13] F.Jona, D.Sondericker and P.M.Marcus, *J. Phys. C*, **13**(1980),L155.
- [14] H.B.Nielsen and D.L.Adams, *J. Phys. C*, **15**(1982),615.
- [15] J.R.Noonan and H.L.Davis, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A8**(1990),2671.
- [16] D.L.Adams, V.Jense, X.F.Sun *et al.*, *Phys. Rev.*, **B38**(1988),7913.
- [17] D.L.Adams and C.S.Sorensen, *Surf. Sci.*, **166**(1986),495.
- [18] J.R.Noonan, H.L.Davis and W.Erley, *Surf. Sci.*, **152**(1985),142.
- [19] K.P.Bohnen and K.M.Ho, *Surf. Sci.*, **207**(1988),105.
- [20] A.Eguiluz, *Phys. Rev.*, **B35**(1987),5473.
- [21] A.M.Rodriguez, G.Bozzolo and J.Ferrante, *Surf. Sci.*, **289**(1993),100.
- [22] T.Ning, Q. Yu and Y.Ye, *Surf. Sci.*, **206**(1988),L857.
- [23] K.W.Jacobsen, J.K.Nørskov and M.J.Puska, *Phys. Rev.*, **B35**(1987),7423.
- [24] R.N.Barnett, U.Landman and C.L.Cleveland, *Phys. Rev.*, **B27**(1983),6534; **B28**(1983),1685.
- [25] K.M.Ho and K.P.Bohnen, *Phys. Rev.*, **B32**(1985),3446.

- [26] S.P.Chen, D.J.Srolovitz and A.F.Voter, *J. Mater. Res.*, **4**(1989), 62.
- [27] R.J.Needs, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 53.
- [28] N.D.Lang and W.Kohn, *Phys. Rev.*, **B1**(1970), 4555.
- [29] P.J.Feibelman, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 2532.
- [30] R.P.Gupta, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 6265.
- [31] S.P.Chen, *Surf. Sci.*, **264**(1992), L162.

MULTILAYER RELAXATION OF Al SURFACE

APPLICATION OF THE MODIFIED EMBEDDED-ATOM POTENTIALS

SHEN SAN-GUO WAN JUN FAN XI-QING

(*Physics and Engineering College, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052*)

(Received 22 November 1996)

ABSTRACT

The multilayer relaxation of Al(100), (110), (111) and (210), (211), (310), (311) and (331) surfaces is calculated using the modified embedded atom method. The results are in good agreement with the experimental data and first-principle calculations. Especially, the results for Al(100) and (111), which show “anomalous” behaviors in surface relaxation, that is both exhibit expansions between the first two layers, are consistent with the experimental data. It is suggested that these expansions are mainly due to the increase of electronic s state and the decrease of p state in the bonds between the first two layers.

PACC: 6820