Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 253 – 259

Динамическая стабильность субмонослойных структур в системе Li/Cu(111)

Г. Г. Русина[+1)], *С. Д. Борисова*[+], *Е. В. Чулков*[*]

[+]*Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, 634021 Томск, Россия*

[*]*Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastián/Donostia, Spain*

Поступила в редакцию 17 июня 2022 г.
После переработки 13 июля 2022 г.
Принята к публикации 14 июля 2022 г.

С использованием межатомных потенциалов, полученных в рамках метода погруженного атома, проведены теоретические расчеты равновесной кристаллической структуры и колебательных свойств в системе Li/Cu(111). Были рассмотрены субмонослойные структуры $p(3 \times 3)$, $p(2 \times 2)$, $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, формирующиеся при степенях адсорбции лития от 0.11 до 0.33 монослоя и бислойная структура (2×2)-3Li. В работе приводятся данные поверхностной релаксации, фононные спектры и локальная плотность распределения колебательных состояний на адатомах и атомах подложки. Расчеты показали, что при субмонослойной адсорбции лития на поверхность Cu(111) увеличение степени адсорбции приводит к нехарактерной для щелочных металлов зависимости энергии низкочастотных продольных колебаний адатомов. В интервале от 0.11 до 0.56 монослоя энергия таких колебаний снижается, вплоть до мнимых значений при достижении насыщенного монослойного покрытия. Дальнейшее увеличение степени адсорбции до 0.75 монослоя приводит к формированию динамически устойчивой структуры Cu(111)-(2×2)-3Li. Для данной структуры характерна сильная гибридизация всех типов колебаний атомов Li и подложки.

DOI: 10.31857/S123456782216011X, EDN: jhxulb

Субмонослойная адсорбция атомов различных элементов может приводить к образованию двумерного упорядоченного слоя адсорбата, поверхностного сплава и кластеров на металлических поверхностях [1–3]. При этом изменение даже малого количества адатомов может качественно менять электронную структуру и динамику электронных возбуждений в системе адатом-подложка [4]. Геометрия поверхности подложки также оказывает влияние на характер взаимодействия адсорбат-подложка и адсорбат-адсорбат и, как следствие, на электрон-электронное и электрон-фононное взаимодействие, что приводит к образованию новых электронных и фононных состояний, связанных с адатомами [5–7].

Интерес экспериментаторов и теоретиков, проявляемый к исследованию субмонослойной адсорбции щелочных металлов (ЩМ) на поверхностях металлов с различной ориентацией, обусловлен заметным влиянием на физико-химические свойства подложки и способностью формировать упорядоченные адсорбционные структуры [8–12]. Например, для плотноупакованной поверхности (111) большинства ГЦК металлов было установлено, что при низких температурах и субмонослойных степенях покрытия ЩМ формируется двумерный слой адсорбата. При этом атомы Na и K, как правило, находятся в трехцентровых ГЦК и ГПУ положениях адсорбции, а Cs и Rb располагаются над атомами поверхностного слоя подложки [8, 9, 13, 14]. С точки зрения динамики, особенностью субмонослойной адсорбции ЩМ является постоянство энергии высокочастотных дипольно-активных колебаний, поляризованных строго перпендикулярно поверхности подложки, и повышение энергии низкочастотных продольных колебаний адатомов, параллельных плоскости поверхности подложки. Это характерно для Na, K, Cs и Rb вне зависимости от положения адатомов и ориентации поверхности подложки [15, 16]. Что касается субмонослойной адсорбции Li, то для системы Li/Cu(111) экспериментально была обнаружена нетипичная зависимость энергии дипольно-активной моды от степени адсорбции. С использованием ДМЭ (дифракция медленных электронов) было обнаружено повышение энергии дипольно-активной моды с 38 до 43 мэВ в интервале степеней адсорбции от 0.15 до 0.33 монослоя (МС) [15]. Кроме того, вслед-

[1)]e-mail: rusina@ispms.tsc.ru

ствие высокой летучести Li, экспериментально определить структуру и места адсорбции Li на поверхности Cu(111) при субмонослойной адсорбции оказалось затруднительно. Упорядоченная структура была обнаружена лишь при степени адсорбции 0.75 МС Li на Cu(111). В данной структуре 6 атомов Li располагаются в неэквивалентных трех-центровых ГЦК и ГПУ положениях, формируя сотовую структуру вокруг одного атома Li, замещающего поверхностный атом подложки [17, 11].

Исходя из наличия экспериментальных трудностей при определении устойчивых субмонослойных структур и нетипичной для адсорбции ЩМ на металлическую поверхность зависимости колебательных мод от степени адсорбции, привлечение теоретических методов к исследованию формирования энергетически и динамически устойчивых субмонослойных структур лития на Cu(111) вполне оправдано. Во многих случаях для данных структур экспериментальные методы позволяют определить частоты колебаний только в центре двумерной зоны Бриллюэна (ЗБ). Однако особенности фононного спектра, указывающие на неустойчивость адсорбционной структуры, зачастую проявляются вдоль симметричных направлений двумерной ЗБ. Используемый в работе подход позволяет получить полную информацию о колебательном спектре двумерной поверхностной структуры.

В настоящей работе представлены результаты детального исследования возможных устойчивых кристаллических структур и колебательных свойств системы Li/Cu(111) при различных степенях адсорбции лития. Рассчитаны релаксация поверхности, фононные спектры, а также плотность распределения колебательных состояний на адатомах и в атомных слоях подложки. Поверхность Cu(111) моделировалась 31-слойной пленкой, на противоположные стороны которой упорядоченным образом наносились адатомы лития. Оптимизация структуры (релаксированная геометрия) проводилась методом молекулярной динамики при нулевой температуре одновременно для всей системы и с демпфированием атомных скоростей по схеме Верлета (временной шаг 10^{-12} с) [18]. Во всех расчетах использовались межатомные потенциалы чистых элементов, построенные в рамках метода погруженного атома (МПА), потенциал взаимодействия Li-Cu брался в форме [19, 20]:

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

где φ_A и φ_B – парные потенциалы лития и меди, а $\rho_A(r)$ и $\rho_B(r)$ – их атомные плотности.

Отсчет атомных слоев медной пленки ведется от поверхности: первый – Cu_s, второй – Cu_{s-1} и т.д. Собственные значения частот колебаний и векторов поляризации рассчитывались из динамической матрицы. Локальная плотность колебательных состояний (LDOS – *local density of states*) определялась проекцией этих собственных значений на интересующий атом в направлениях X, Y и Z. Количество атомов, входящих в расчетную ячейку для рассматриваемых структур, варьировалось от 128 до 514.

На рисунке 1a–d показаны двумерные адсорбционные структуры, полученные после расчета релаксации системы Li/Cu(111). Проведенные расчеты релаксации показали, что при субмонослойной адсорбции Li на поверхность Cu(111) адатомы располагаются в 3-х центровых ГЦК положениях и упорядочиваются в сверхструктурах (3×3)-Li, (2×2)-Li и $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30°$-Li, в соответствии со степенью адсорбции 0.11 МС, 0.25 МС и 0.33 МС. При 0.75 МС адатомы после релаксации формируют сложную структуру сотового типа Cu(111)-(2×2)-3Li. Особенностью данной структуры является неэквивалентность положений адсорбции адатомов и сосуществование фрагментов поверхностного сплава и адслоя. Один атом Li в положении замещения окружен 6 атомами Li в ГЦК и ГПУ положениях, соединяя одновременно адслой и поверхностный сплав (см. рис. 1d). Ближайшее расстояние между атомами Li в данной структуре составляет 2.95 Å, что на 2.3 % меньше объемного значения 3.02 (Å). В элементарную ячейку входят 3 неэквивалентных атома Li и 4 атома от подложки. Два адатома находятся в ГЦК и ГПУ положениях и один адатом в положении замещения. Кроме того, нахождение Li в неэквивалентных местах адсорбции приводит к разнонаправленному характеру релаксационных смещений атомов внутри одного слоя, приводя к появлению коробления структуры в приповерхностных слоях подложки. Значения вертикальной релаксации для субмонослойных адсорбционных структур приведены в табл. 1. Как следует из данных табл. 1, увеличение степени адсорбции приводит к снижению вертикальной релаксации и для Cu(111)-$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30°$-Li ее значение практически соответствует релаксации чистой поверхности Cu(111), которая составила $\Delta_{12} = -1.05\,\%$ и $\Delta_{23} = -0.07\,\%$. Это согласуется с DFT расчетом $\Delta_{12} = -1.0\,\%$, $\Delta_{23} = -0.2\,\%$ [21] и экспериментальным значением $\Delta_{12} = -1.0 \pm 0.4\,\%$ [22]. Имеющееся коробление структуры поверхностного слоя снижается с $\delta_s = 0.06$ Å для Cu(111)-(3×3)-Li до $\delta_s = 0.03$ Å

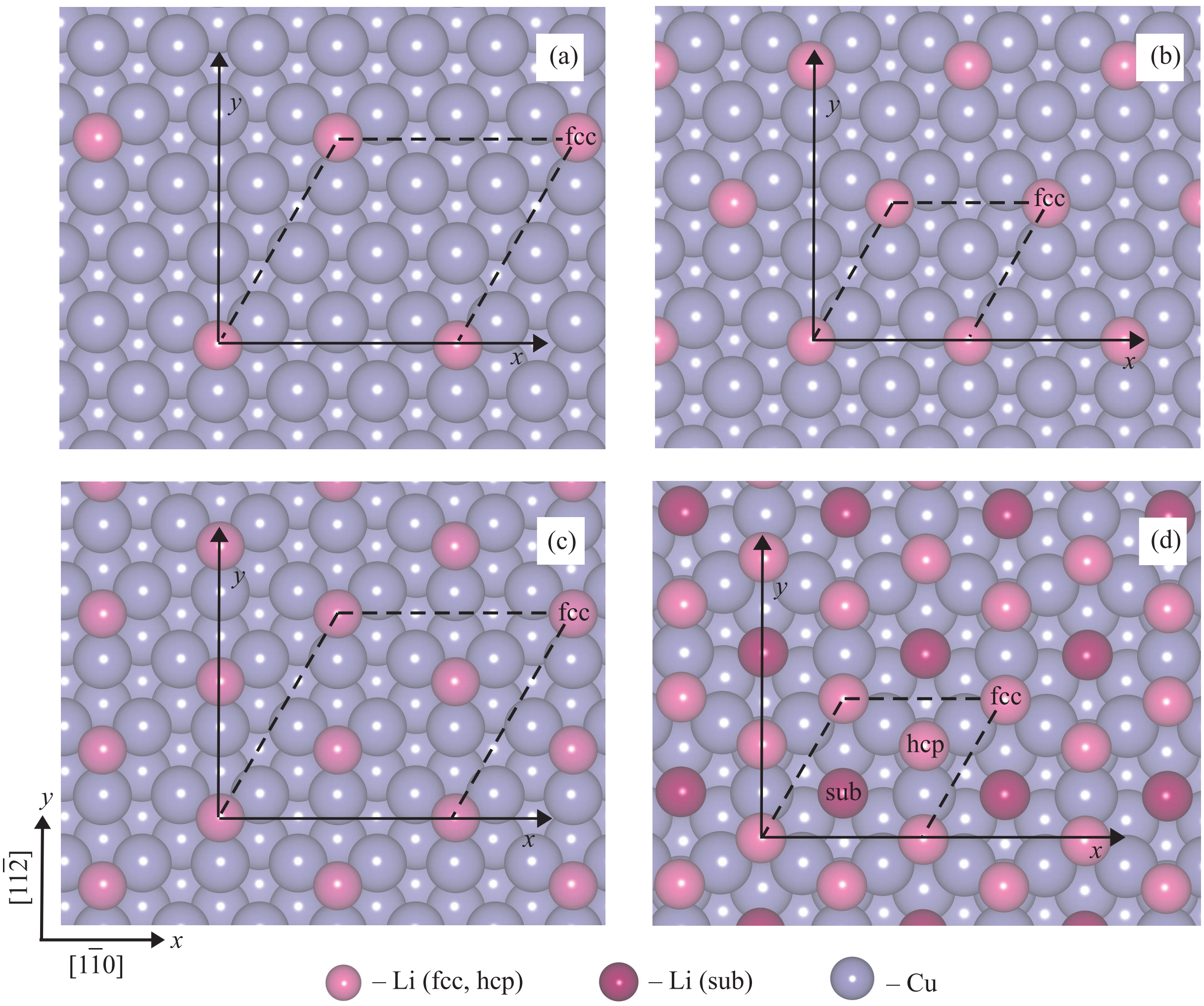

Рис. 1. (Цветной онлайн) Геометрические модели поверхностных сверхструктур и соответствующие им элементарные ячейки (3×3) и (2×2) (пунктирные линии) при степенях адсорбции лития: (a) – 0.11 МС; (b) – 0.25 МС; (c) – 0.33 МС; (d) – 0.75 МС. Места адсорбции атомов Li обозначены как fcc (ГЦК), hcp (ГПУ) и sub (замещение)

Таблица 1. Вертикальная релаксация поверхности Cu(111) при разной степени адсорбции Li. Положительные (отрицательные) значения у Δ_{ij} (%) означают расширение (сжатие) межслоевых расстояний, Δ_{ij} – для ближайших к Li атомов Cu и Δ'_{ij} – для всех остальных атомов Cu. $h_{\text{Li-Cu}}$ (Å) – вертикальное расстояние до поверхностного слоя подложки

Cu(111)-(3×3)-Li					
Положение Li	Δ_{12}	Δ'_{12}	Δ_{23}	Δ'_{23}	$h_{\text{Li-Cu}}$
ГЦК	−2.1	−0.5	−0.3	+0.2	2.19
Cu(111)-(2×2)-Li					
ГЦК	−2.0	−0.6	−0.1	+0.5	2.20
Cu(111)-$(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30°$-Li					
ГЦК	−0.7	−0.7	+0.4	−0.1	2.21

Таблица 2. Релаксационные изменения межслоевых расстояний поверхности Cu(111) при адсорбции 3 атомов Li (0.75 МС) в неэквивалентные положения. Δ_{ij} – значения релаксации для ближайших к Li атомов Cu

Структура Cu(111)-(2×2)-3Li				
	$h_{\text{Li-Cu}}$		Δ_{12}	Δ_{23}
Положение Li	МПА	Эксперимент [9]	Cu	Cu
ГЦК	2.35	2.10 ± 0.06	–	−0.3
ГПУ	2.36	2.15 ± 0.86	−0.7	−1.7
Замещение	0.71	0.61 ± 0.15	−3.3	+0.9

для Cu(111)-$(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30°$-Li. В более глубоких слоях подложки значения межслоевых расстояний соответствуют объемным. Усиление взаимодействия адатом-адатом приводит к появлению незначительных латеральных смещений ($\Delta_{x,y}\sim0.02$ Å) ближайших поверхностных атомов Cu в направлениях от адатомов лития.

Для структуры Cu(111)-(2×2)-0.75 МС Li рассчитанные значения вертикальной релаксации для ближайших к Li атомов Cu приведены в табл. 2. Как можно видеть из табл. 2, максимальные значения релаксации характерны для поверхностного слоя (Δ_{12}). Коробление структуры наблюдается в трех подповерхностных слоях $\delta_{s-1} = 0.05$ Å, $\delta_{s-2} = 0.03$ Å, $\delta_{s-3} = 0.01$ Å. Латеральные смещения вдоль направления $[11\bar{2}]$ составили dy $= \pm 0.01$ Å в Cu_s и dy $= \pm 0.02$ Å в Cu_{s-1} слоях подложки. Эти значения попадают в интервал экспериментальных данных dy $= 0.00 \pm 0.08$ Å в Cu_s и dy $= 0.00 \pm 0.11$ Å в Cu_{s-1}, полученных ДМЭ в работе [9].

На рисунке 2a, b приведены двумерные ЗБ рассматриваемых сверхструктур и правила отражения симметричных точек ЗБ исходной (1×1) структуры. Фононные спектры рассчитывались вдоль всех симметричных направлений двумерной ЗБ и представлены на левой панели рис. 3a–d. Степень локализации, поляризация и энергия колебательных мод адсорбата наглядно представлены локальной плотностью фононных состояний (LDOS) (правая панель рис. 3a–d) и табл. 3. Фононные спектры рассматриваемых субмонослойных структур имеют типичный характер для адатомов в ГЦК положениях адсорбции. В области высоких частот имеется дипольно-активная S-мода (*stretching* – растягивающая), распространяющаяся выше потолка проекции объемных колебаний подложки. Это является отличительной чертой адсорбции лития в ГЦК положениях адсорбции на металлическую поверхность. В низкочастотной области продольные колебания адатомов, гибридизуясь с вертикальными колебаниями подложки, формируют FT-моду (*frustrated translation*) несостоявшихся трансляций в плоскости адслоя.

Для структуры Cu(111)-$p(3 \times 3)$-Li в центре ЗБ (точка $\overline{\Gamma}$) имеются две моды продольных колебаний (см. рис. 3a). Низкочастотная FT-мода, имеющая XY-поляризацию, распространяется в области низкочастотных объемных YZ-колебаний подложки и вдоль всех симметричных направлений ЗБ. Энергия этой моды сохраняет постоянное значение ~ 8 мэВ и в LDOS ей соответствует сильно локализованный низкочастотный пик. В окрестности центра ЗБ эта мода определяется совместными продольными колебаниями адатомов и инициированными ею низкочастотными вертикальными колебаниями атомов с Cu_s слоя. При движении к границе ЗБ (точки $\overline{\mathrm{K}'}$ и $\overline{\mathrm{M}'}$) состояние становится дисперсным и появляется тенденция к его расщеплению. Это обусловлено гибридизацией FT-моды адсорбата с акустическими модами подложки: одна смешивается преимущественно с X-, а вторая с YZ-поляризованными модами подложки. В области энергий ~ 20 мэВ обнаруживается мода резонансных продольных колебаний адатомов, глубоко распространяющихся в область объемных колебаний подложки из-за усиления взаимодействия с вертикальными колебаниями с Cu_{s-1} и Cu_{s-2} слоев подложки. В LDOS ей соответствует слабо локализованный, размытый пик. S-моде в LDOS соответствует пик Z-колебаний при энергии ~ 46 мэВ, с максимальной локализацией (93 %) на атомах Li и лишь на 7 % на атомах подложки с Cu_s и Cu_{s-1} слоев.

Таблица 3. Энергия (мэВ) колебательных мод Li в симметричных точках двумерной зоны Бриллюэна для адсорбционных структур. Для структуры (2×2)-3Li приведены значения энергии колебаний для разных положений адатомов: (I) ГЦК, (II) замещения, (III) гибридизованные колебания

Структура	$\overline{\Gamma}$	$\overline{\mathrm{K}'}$	$\overline{\mathrm{M}'}$
(3×3)-Li	8.2	7.9	8.0
	19.8	20.6	20.9
	46.8	45.9	46.5
(2×2)-Li	8.6	5.7	4.9
	–	6.6	7.4
	21.7	20.6	20.9
	46.4	45.4	45.6
$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$-Li	5.2	4.2	1.4
	–	–	5.0
	8.6	7.8	7.1
	19.3	21.0	19.1
	45.0	45.0	44.2
(2×2)-3Li	–	8.8–9.7 (I)	8.6 (I)
	15.2–16.2 (I)	13.2 (II)	13.8 (II)
	20.3–22.8 (II)	–	–
	27.7 (I)	27.2 (III)	26.8 (III)
	–	–	31.5 (III)
	35.7 (I)	35.4 (I)	35.6 (I)
	37.9 (I)	36.9 (II)	36.6 (I)
	53.5 (II)	52.7 (I)	51.4 (II)
	–	–	53.1 (II)

Фононный спектр, LDOS и энергия локализованных мод в симметричных точках ЗБ структуры Cu(111)-$p(2 \times 2)$-Li представлены на рис. 3b и в табл. 3. Обращает на себя внимание низкочастотная FT-мода. Энергия моды в точке $\overline{\Gamma}$ остается практически неизменной, как и для структуры Cu(111)-$p(3 \times 3)$-Li. Однако при движении к границе ЗБ, имеющаяся тенденция к расщеплению усиливается, и в точках $\overline{\mathrm{K}'}$ и $\overline{\mathrm{M}'}$ наблюдаются две FT-моды с преимущественной Y- или X-поляризацией. При этом в точке $\overline{\mathrm{M}'}$ эти моды распространяются уже ниже дна проекции объемных колебаний подложки, а их энергия снижается на 2.7 и 3.7 мэВ соответственно. Степень локализации этих колебаний снижается, а область размытия и низкочастотный сдвиг YZ-колебаний по-

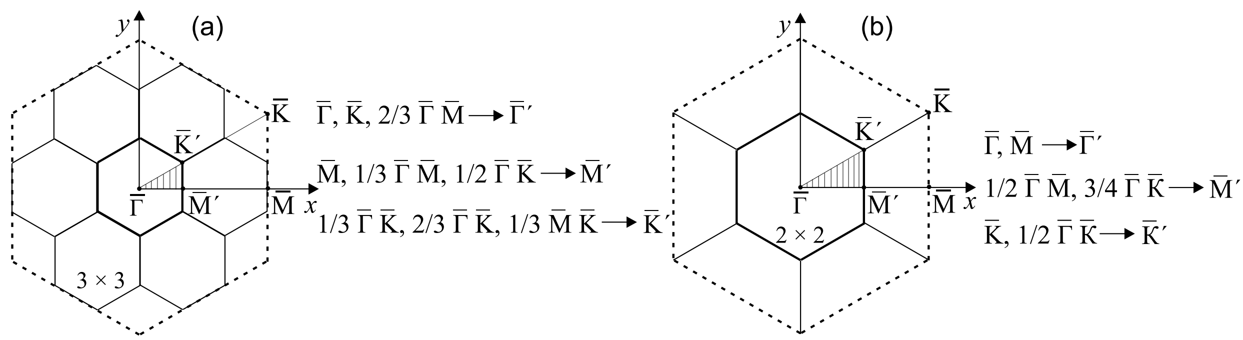

Рис. 2. Двумерные зоны Бриллюэна для сверхструктур с элементарной ячейкой: (a) – (3×3) и (b) – (2×2). Здесь же приведены правила отражения симметричных точек исходной зоны Бриллюэна (1×1)

верхностных атомов подложки увеличивается. Резонансная высокочастотная продольная мода сохраняет свою энергию при незначительном снижении степени локализации. Из таблицы 3 видно, что энергия дипольно-активной S-моды на границе ЗБ также незначительно снижается (см. LDOS на рис. 3b).

Увеличение степени адсорбции до 0.33 МС приводит к появлению в фононном спектре структуры Cu(111)-$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30°$-Li расщепления FT-моды в точке $\overline{\Gamma}$ (рис. 3c). Верхняя по энергии мода (~ 8.5 мэВ) сохраняет XY-поляризацию и соответствует характеру ее распространения в структуре Cu(111)-$p(3 \times 3)$-Li. Нижняя мода (5.2 мэВ в $\overline{\Gamma}$) в направлениях $\overline{\Gamma\mathrm{K}'}$ и $\overline{\Gamma\mathrm{M}'}$ расщепляется на две продольные моды с $X > Y$ и $Y > X$ поляризацией. В точке $\overline{\mathrm{K}'}$ они вырождаются, а в точке $\overline{\mathrm{M}'}$ происходит значительное понижение энергии моды с $X > Y$ поляризацией и энергетическая щель между состояниями возрастает. В фононном спектре в направлении $\overline{\Gamma\mathrm{M}'}$ и в точке $\overline{\mathrm{M}'}$ энергия X-моды снижается до 1.4 мэВ. Анализ рассчитанных векторов поляризации показал, что эта мода в $\overline{\mathrm{M}'}$ определяется неупорядоченными смещениями адатомов, в которых компонента смещений вдоль $[1\bar{1}0]$ имеет наименьшую энергию. Для Y-поляризованного состояния в направлениях $\{110\}$ характерно связанное смещение адатомов, объединенных в тройки. Как видно из LDOS (правая панель рис. 3c) и табл. 3, весь спектр локализованных колебаний в структуре Cu(111)-$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30°$-Li испытывает низкочастотный сдвиг. Для устойчивости адсорбционной структуры такой сдвиг продольных колебаний представляется критическим. Энергия дипольно-активной S-моды составила 45 мэВ в точке $\overline{\Gamma}$ (см. табл. 3). Этот результат согласуется с экспериментальным значением S-моды, равным 43 мэВ [15].

Расчет релаксации системы Li/Cu(111) при достижении степени адсорбции насыщенного монослоя 0.56 МС показал возможность существования энергетически устойчивой структуры Cu(111)-(4×4)-Li, в элементарную ячейку которой входят 9 атомов Li и 16 атомов Cu. Однако расчет фононного спектра показал наличие моды продольных колебаний с мнимой частотой в направлении $\overline{\Gamma\mathrm{M}'}$ двумерной ЗБ, соответствующей данной структуре, что свидетельствует о ее неустойчивости в данном направлении к любым внешним воздействиям.

Геометрия адсорбционной структуры сотового типа Cu(111)-(2×2)-3Li, формирующейся при дальнейшем увеличении степени осаждения до 0.75 МС показана на рис. 1d. Расчет релаксации показал высокую энергетическую устойчивость данной структуры, что согласуется с данными ДМЭ эксперимента [9]. Фононный спектр, LDOS и энергия колебательных состояний, локализованных на адатомах в разных положениях адсорбции приведены на рис. 3d и в табл. 3. Поскольку энергетическая разница между ГЦК и ГПУ 3-х центровыми положениями адсорбции не превышает 0.001 мэВ, то колебательные состояния, локализованные на адатомах в этих положениях, в фононном спектре не разделялись, и при дальнейшем обсуждении будем использовать только термин ГЦК. Как видно на рис. 3d, фононный спектр данной структуры имеет сложный характер. В нем присутствуют моды, характерные как для адслоя, так и для поверхностного сплава. Для атомов Li в ГЦК положениях адсорбции энергия S-моды снижается до 35 мэВ, а энергия FT-моды в точках $\overline{\mathrm{K}'}$ и $\overline{\mathrm{M}'}$ возрастает до ~ 8.5 мэВ, по сравнению с субмонослойными структурами. В то же время, Рэлеевские колебания подложки сильно гибридизованы с FT-колебаниями атомов Li в 6-ти центровых положениях замещения, а Z-колебания этих адатомов смешиваются с продольными колебаниями атомов с поверхностного слоя меди. В обоих случаях колебания распространяются в области объемных фоно-

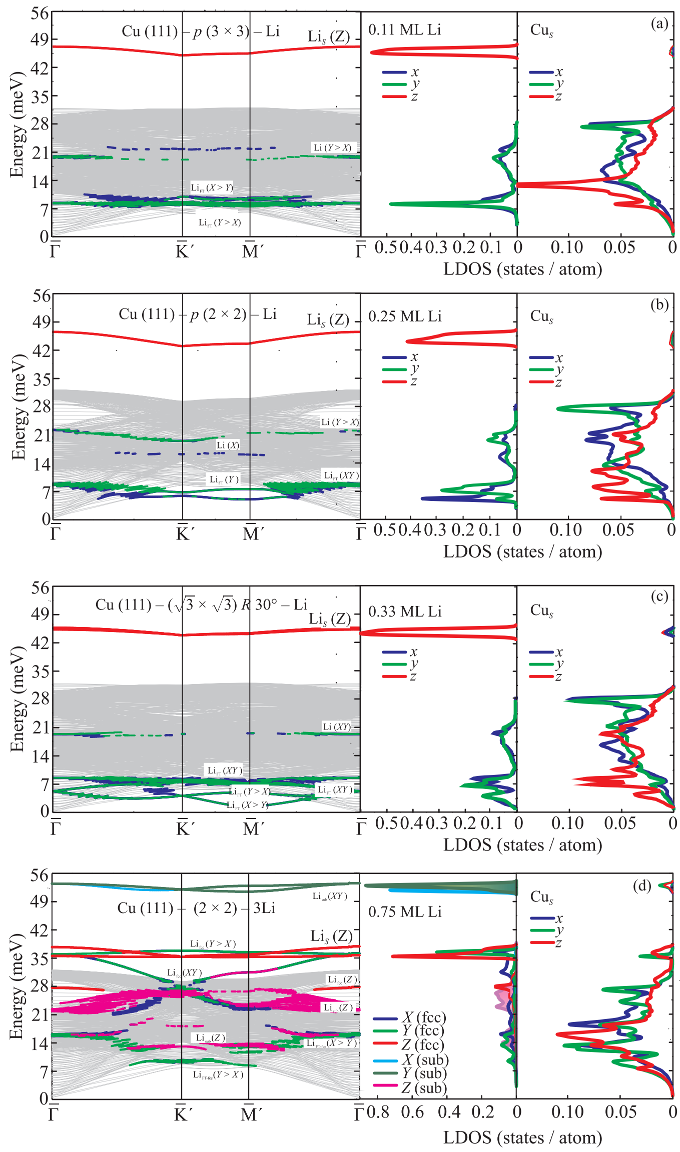

Рис. 3. (Цветной онлайн) (Левая панель) Фононные спектры сверхструктур: (a) – Cu(111)-(3 × 3)-Li; (b) – Cu(111)-p(2 × 2)-Li; (c) – Cu(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)$R30^\circ$-Li; (d) – Cu(111)-(2 × 2)-3Li, рассчитанные вдоль симметричных направлений двумерной ЗБ. Цветными линиями показаны колебательные моды атомов Li, буквами обозначена поляризация локализованных мод. Дипольно-активная мода обозначена Li_s, мода низкочастотных продольных колебаний адатома в 3-центровых положениях адсорбции обозначена $\mathrm{Li}_{\mathrm{FT\text{-}fcc}}$, а в положениях замещения обозначена $\mathrm{Li}_{\mathrm{FT\text{-}sub}}$. (Правая панель) Локальные плотности колебательных состояний (LDOS) представлены раздельно для атомов Li и Cu_s слоя подложки

нов подложки, что обусловлено сильным взаимодействием адатома Li с окружающими атомами поверхностного слоя подложки. Фононный спектр поверхностной структуры сжимается, что отражает существование баланса взаимодействия адатом-адатом и адатом-подложка.

Анализ полученных данных по равновесной структуре и фононам субмонослойных структур лития на поверхности Cu (111) показал, что при низких температурах возможна реализация энергетически и динамически устойчивых структур только при степенях адсорбции до 0.25 МС. Дальнейшее повышение плотности адслоя, вплоть до насыщенного монослоя, которое достигается при степени адсорбции 0.56 МС, приводит к снижению энергии продольных колебаний адатомов лития вдоль направления $\overline{\Gamma \mathrm{M}'}$ двумерной ЗБ с минимальным значением в $\overline{\mathrm{M}'}$. Такой низкочастотный сдвиг продольных колебаний, определяемых взаимодействием адатом-адатом, является причиной динамической неустойчивости субмонослойной структуры Li на поверхности Cu(111) при степенях адсорбции 0.33 и 0.56 МС Li вдоль направления $\overline{\Gamma}\overline{\mathrm{M}}'$. Также выявлена зависимость энергии S- и FT-мод от степени субмонослойного покрытия, выраженная в снижении их энергии при увеличении плотности адслоя. Проведенные структурные и динамические расчеты для Cu(111)-(2×2)-3Li показали ее высокую устойчивость. Полученные результаты согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена в рамках Госзадания для ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0001.

---

1. K. Oura, V. G. Lifshits, A. A. Saranin, A. V. Zotov, and M. Katayama, *Surface Science: An Introduction*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2003), 439 p.
2. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **100**, 261 (2014) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **100**, 621 (2014)].
3. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **114**, 82 (2021) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **114**, 85 (2021)].
4. E. V. Chulkov, J. Kliewer, R. Berndt, V. M. Silkin, B. Hellsing, S. Crampin, and P. M. Echenique, Phys. Rev. B **68**, 195422 (2003).
5. C. Corriol, V. M. Silkin, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, E. V. Chulkov, P. M. Echenique, T. von Hofe, J. Kliewer, J. Kröger, and R. Berndt, Phys. Rev. Lett. **95**, 176802 (2005).
6. S. V. Eremeev, I. Yu. Sklyadneva, P. M. Echenique, S. D. Borisova, G. Benedek, G. G. Rusina, and E. V. Chulkov, Surf. Sci. **601**, 4553 (1995).
7. G. Benedek, M. Bernasconi, K.-P. Bohnen, D. Campi, E. V. Chulkov, P. M. Echenique, R. Heid, I. Yu. Sklyadneva, and J. P. Toennies, Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 7159 (2014).
8. R. D. Diehl and R. McGrath, Surface Science Reports **23**, 41, (1996).
9. H. Tochihara and S. Mizuno, Progress in Surface Science **58**, 1 (1998).
10. H. Ishida, Surf. Sci. **242**, 341 (1991).
11. J. M. Carlsson and B. Hellsing, Phys. Rev. B **61**, 13973 (2000).
12. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **109**, 621 (2019) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **109**, 600 (2019)].
13. D. L. Adler, I. R. Collins, X. Liang, S. J. Murray, G. S. Leatherman, and K.-D. Tsuei, Phys. Rev. B **48**, 17445 (1993).
14. L. Padilla-Campos, A. Toro-Labb, and J. Maruani, Surf. Sci. **385**, 24 (1997).
15. S.-A. Lindgren, C. Svensson, L. Wallden, A. Carlsson, and E. Wahlström, Phys. Rev. B **54**, 10912 (1996).
16. S. D. Borisova, G. G. Rusina, S. V. Eremeev, G. Benedek, P. M. Echenique, I. Yu. Sklyadneva, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **74**, 165412 (2006).
17. S. Mizuno, H. Tochihara, A. Barbieri, and M. A. van Hove, Phys. Rev. B **51**, 7981 (1995).
18. L. Verlet, Phys. Rev. **159**, 98 (1967).
19. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, Phys. Rev. B **33**, 7983 (1986).
20. R. A. Johnson, Phys. Rev. B **39**, 12554 (1989).
21. R. Heid and K.-P. Bohnen, Phys. Rep. **387**, 151 (2003).
22. K. H. Chae, H. C. Lu, and T. Gustafsson, Phys. Rev. B **54**, 14082 (1996).