## Kapitel 4

# Der Einfluß der Depositionsenergie auf die Wechselwirkung zwischen Adsorbat und Substrat

In diesem Kapitel wird der Einfluß einer geänderten Adsorbat-Morphologie auf die Wechselwirkung zwischen Adsorbat und Substrat untersucht. Als Modellsystem dient Ag<sub>9</sub>/HOPG. Durch die Variation der Depositionsenergie der Cluster (3, 10, 20, 50, 60 eV/Cluster) wird eine veränderte Adsorbat-Morphologie erzeugt. Die experimentellen Resultate dieses Kapitels zeigen, daß die veränderte Adsorbat-Morphologie zu einer veränderten Adsorbat-Substrat-Wechselwirkung führt, die sich im Experiment durch einen Änderungen des Ladungstransfers und der Relaxationszeiten bemerkbar macht.

Für einen großen Teil der Experimente wurden von R. Neuendorf und R. Smith Molekulardynamik-Simulationen erstellt [1]. Die Simulationen zeigen, daß die Cluster mit zunehmender Depositionsenergie flacher werden und bei 50 eV/Cluster nahezu zweidimensional sind. Innerhalb der Simulationsdauer von 20 ps erfahren die Cluster bei höheren Depositionsenergien eine laterale Diffusion auf der Substrat-Oberfläche, die allerdings nicht zur Bildung von Nanopartikeln führt, wie die Ergebnisse von Kap. 5 zeigen werden. Hinsichtlich der Ursache für die im Experiment beobachteten Veränderungen des Ladungstransfers und der Relaxationszeiten werden die verschiedenen Adsorptionsplätze für das Ag-Adsorbat, sowie eine Änderung der Energieniveaus der Cluster aufgrund der geometrischen Deformation diskutiert.

Die Untersuchung dieser Charakteristika in Abhängigkeit von der Depositionsenergie ist aufschlußreich, da sich aus den bisher in der Literatur vorhandenen Untersuchungen an massenselektierten Silber-Clustern auf HOPG keine Angaben über die Bedingungen für eine Deposition separierter kleiner Ag-Cluster ohne nachfolgende Bildung von Nanopartikeln auf HOPG ableiten lassen. Schaffner et al. schließen aus Photoemissions-Experimenten an 0.2 ML Ag<sub>n</sub> (n = 1 – 5), deponiert mit 10 ± 4 eV pro Cluster auf HOPG (70 K), auf eine Mobilität und Inselbildung der Cluster auf der Substrat-Oberfläche [2]. Im Gegensatz dazu zeigt die vorliegende Arbeit, daß sich die Bildung von Silber-Nanopartikeln auch bei höheren Depositionsenergien mit der Wahl einer geringeren Adsorbat-Bedeckung verhindern läßt.

#### 4.1 Experimentelle Resultate

Die Experimente wurden vorwiegend an Ag<sub>9</sub>-Clustern durchgeführt. Wie in den in Kap. 3 beschriebenen Experimenten beträgt die Bedeckung 0.04 ML, die Substrat-Temperatur 100 K und die Photonenenergie 3.18 eV. Die Depositionsenergie beträgt 3, 10, 20, 50 und 60 eV pro Cluster. Der experimentelle Aufbau ist für eine solche Untersuchung hervorragend geeignet, da er auch bei höheren Depositionsenergien schmale Energieverteilungen von  $\pm 1$  eV zuläßt. Die maximale Depositionsenergie von 60 eV/Cluster orientiert sich an den in der Literatur bekannten Schwellenwerten, unterhalb derer keine Defekte im Substrat zu erwarten sind. Die Schwelle ist von Smith und Beardmore für die Deposition von Kohlenstoff-Atomen auf Graphit in einer Molekular-dynamik-Simulation mit 34 eV/Atom angegeben worden [3]. Hahn und Kang beobachten experimentell ab 50 eV/Ion Defekte auf Graphit-Oberflächen bei der Deposition von Argon- und Krypton-Ionen [4].

**Abb. 4-1** zeigt typische 2PPE-Spektren für verschiedene Depositionsenergien. Im Vergleich zu dem unten im Bild dargestellten Spektrum für 3 eV sind die Spektren für 10, 20, 50 und 60 eV zu höheren kinetischen Energien der Photoelektronen verschoben. Die Spektren für 10, 20, 50 und 60 eV Depositionsenergie erscheinen untereinander recht ähnlich.

In **Abb. 4-2** ist die mit Hilfe der linearen Extrapolation ermittelte Abbruchkante der Spektren bei  $E_{kin,min}$  dargestellt, während in **Abb. 4-3** die Abbruchkante bei  $E_{kin,max}$  und in **Abb. 4-4** der Schwerpunkt der Spektren zu sehen ist.



Abb. 4-1: Typische 2PPE-Spektren für 0.4 ML Ag<sub>9</sub>/HOPG bei verschiedenen Depositionsenergien. Die Photoelektronen-Intensität ist so normiert, daβ die Spektren gut unterscheidbar sind. Im Vergleich zu dem unten im Bild dargestellten Spektrum für 3 eV sind die Spektren für 10, 20, 50 und 60 eV zu höheren kinetischen Energien der Photoelektronen verschoben. Die schwarze Linie dient zum besseren Vergleich der Spektren.



Abb. 4-2: Niederenergetische Abbruchkante  $E_{kin,min}$  der 2PPE-Spektren in Abhängigkeit von der Depositionsenergie für Ag<sub>9</sub>/HOPG. Der Fehlerbalken resultiert aus der Streuung der Meßwerte.



Abb. 4-3: Hochenergetische Abbruchkante  $E_{kin,max}$  der 2PPE-Spektren in Abhängigkeit von der Depositionsenergie für Ag<sub>9</sub>/HOPG. Der Fehlerbalken resultiert aus der Streuung der Meßwerte.



*Abb. 4-4*: Schwerpunkt der 2PPE-Spektren in Abhängigkeit von der Depositionsenergie für Ag<sub>9</sub>/HOPG. Der Fehlerbalken resultiert aus der Streuung der Meßwerte.



**Abb. 4-5**: Diese Abbildung faßt die Abbn. 4-2 und 4-3 zusammen. Die Achsen sind so skaliert, daß  $E_{kin,min}$  und  $E_{kin,max}$  für 3 eV Depositionsenergie in einem Punkt zusammenfallen. Die linke Ordinatenachse gilt für  $E_{kin,min}$  (Vierecke), die rechte gilt für  $E_{kin,max}$  (Kreuze).

**Abb. 4-5** faßt die Abbildungen 4-2 und 4-3 noch einmal zusammen: die linke y-Achse ( $E_{kin,min}$ ) und die rechte y-Achse ( $E_{kin,max}$ ) sind so skaliert, daß die beiden Werte für das 3 eV-Spektrum genau zusammenfallen. Die Abbildung erlaubt den direkten Vergleich der Abbruchkanten. Die Abbildungen bestätigen den schon in Abb. 4-1 auffallenden Sprung zwischen 3 eV und 10 eV Depositionsenergie. Abb. 4-6 besitzt die gleiche Skalierung wie Abb. 4-5. Die Abbildung dient dem direkten Vergleich zwischen den Spektren für Ag<sub>9</sub>/HOPG, deponiert mit 3 bzw. 10 eV, sowie den Spektren für Ag<sub>8</sub>/HOPG (3 eV) und der reinen HOPG-Probe. Das Spektrum für Ag<sub>9</sub>/HOPG, deponiert mit 3 eV, als vielmehr dem Spektrum von Ag<sub>8</sub>/HOPG, deponiert mit 3 eV.





**Abb. 4-6**: Lage der Abbruchkanten  $E_{kin,min}$  und  $E_{kin,max}$  der 2PPE-Spektren im Vergleich zu Ergebnissen des Kap. 3 (HOPG und Ag<sub>8</sub>). Die Achsen sind so skaliert, daß  $E_{kin,min}$  und  $E_{kin,max}$  für Ag<sub>9</sub>/HOPG bei 3 eV Depositionsenergie in einem Punkt zusammenfallen. Die linke Ordinatenachse gilt für  $E_{kin,min}$  (Vierecke), die rechte gilt für  $E_{kin,max}$  (Kreuze).

gie. In Abb. 4-8 sind die Relaxationszeiten in Abhängigkeit von der Depositionsenergie dargestellt. Der angegebene Fehlerbalken resultiert aus der Meßgenauigkeit für die Laserpulslänge, die  $150 \pm 10$  fs beträgt. Der gemessene Wert von  $190 \pm 15$  fs für 3 eV Depositionsenergie fällt bei 20 eV auf  $100 \pm 25$  fs, um dann bei 60 eV wieder auf  $340 \pm 8$  fs anzusteigen. Während die Meßwerte für 20 eV kaum streuen, wurden für 60 eV in manchen Messungen längere Relaxationszeiten gemessen.



Abb. 4-7: Zeitaufgelöste 2PPE-Spektren für Ag<sub>9</sub>/HOPG mit 10, 20, 50 und 60 eV Depositionsenergie. Dargestellt ist die integrierte Photoelektronen-Intensität in Abhängigkeit von der Verzögerungszeit zwischen beiden Laserpulsen. Negative Verzögerungszeiten bedeuten eine Umkehrung der Pulsreihenfolge



Abb. 4-8: Relaxationszeit in Abhängigkeit von der Depositionsenergie für Ag/HOPG. Der angegebene Fehlerbalken resultiert aus der Meßgenauigkeit für die Laserpulslänge.

#### 4.2 Simulation des Depositionsprozesses

Die Ergebnisse der bisher dargestellten Experimente legen nahe, daß die mit 3 eV deponierten Silber-Cluster nicht auf der Oberfläche diffundieren. Der deutliche Unterschied zwischen 3 eV und 10 eV Depositionsenergie pro Cluster bei den 2PPE-Spektren von Ag<sub>9</sub>/HOPG zeigt eine Veränderung des Systems an. Um einen genaueren Einblick in den Depositionsprozeß für die verschiedenen Depositionsenergien zu erhalten, wurde die Deposition von Ag<sub>9</sub> auf HOPG bei 100 K für 3, 10, 20 und 50 eV von Dr. R. Neuendorf vom Nanoscale Physics Research Laboratory, School of Physics and Astronomy, University of Birmingham und Dr. R. Smith vom Department of Mathematical and Physical Science, Loughborough University, modelliert. Bei den Berechnungen handelt es sich um Molekulardynamik-Simulationen des Cluster-Aufpralls auf die Oberfläche. Für die Berechnungen wurden drei Potentiale für die C-C-, die Ag-Ag- und die Ag-C-Wechelwirkung benutzt. Bei dem C-C-Potential handelt es sich um ein empirisches Vielteilchenpotential nach Brenner, welches die Bindungslängen und -energien für Graphit richtig wiedergibt [5]. Das Ag-Ag-Potential im Cluster ist ein N-Teilchen-Potential nach Ackland et al. [6]. Das Ag-C-Potential ist ein Morse-ähnliches Zwei-Teilchen-Potential nach Rafii-Tabar et al. [7]. Die Potentialparameter des Ag-C-Potentials bestehen aus einer Mischung der Morse-Parameter für Ag-Ag- und C-C-Potentiale. Die Temperatur wird in der Simulation durch die Ankopplung an ein Wärmebad eingestellt [8]. Der Zeitschritt für die Simulationen beträgt 0.75 fs. Die Graphikausgabe erfolgt alle 500 fs und die Gesamtdauer der Simulation beträgt 20 ps. Das Substrat wird durch die Berechnung von 6720 C-Atomen dargestellt.

Abb. 4-9 zeigt die Lage der Ag-Atome in Schritten von 5 ps für eine Depositionsenergie von 3 eV vor einem festgehaltenen Hintergrund von C-Atomen, welcher die oberste Atomlage des Substrats mit seiner hexagonalen Strukur darstellt. Die Größe der eingezeichneten Atome ist nicht maßstabsgerecht und der festgehaltene Hintergrund von C-Atomen vernachlässigt die Bewegung der C-Atome, die mit zunehmender Depositionsenergie in z-Richtung (entlang der Oberflächennormalen) ausgelenkt werden. Die Simulation zeigt, daß sich die Lage der Ag-Atome auf der Oberfläche nach dem Auftreffen des Clusters nur wenig ändert. In Abb. 4-10 wurde lediglich die Depositionsenergie auf 10 eV/Cluster geändert. Bei dieser Depositionsenergie zeigen die Ag-Atome innerhalb der Dauer der Simulation eine Lageveränderung auf der Oberfläche. Der Cluster bewegt sich als Ganzes und innerhalb von 15 ps wechseln die Ag-Atome von ihrem Auftreffort zu der benachbarten hexagonalen Zelle. Bei 20 eV Depositionsenergie/Cluster zeigt sich in Abb. 4-11, daß die laterale Diffusion des Clusters zunimmt, so daß er innerhalb der Simulationsdauer eine größere Distanz überwindet, als bei 10 eV Depositionsenergie/Cluster. Bei der in Abb. 4-12 dargestellten Depositon mit 50 eV/Cluster ist eine veränderte Anordnung der Ag-Atome in x-y-Richtung zu erkennen. Die laterale Diffusion erscheint, verglichen mit der Deposition mit 20 eV, unverändert.



Abb. 4-9: Lage der Ag-Atome in Schritten von 5 ps für Ag<sub>9</sub>, deponiert mit 3 eV, vor einem festgehaltenen Hintergrund von C-Atomen. Zum Zeitnullpunkt befindet sich der Cluster in der Gasphase (nicht eingezeichnet). Die Größe der eingezeichneten Atome ist nicht maßstabsgerecht.



Abb. 4-10: Lage der Ag-Atome in Schritten von 5 ps für Ag<sub>9</sub>, deponiert mit 10 eV, vor einem festgehaltenen Hintergrund von C-Atomen. Zum Zeitnullpunkt befindet sich der Cluster in der Gasphase (nicht eingezeichnet). Die Größe der eingezeichneten Atome ist nicht maßstabsgerecht.



Abb. 4-11: Lage der Ag-Atome in Schritten von 5 ps für Ag<sub>9</sub>, deponiert mit 20 eV, vor einem festgehaltenen Hintergrund von C-Atomen. Zum Zeitnullpunkt befindet sich der Cluster in der Gasphase (nicht eingezeichnet). Die Größe der eingezeichneten Atome ist nicht maßstabsgerecht.



Abb. 4-12: Lage der Ag-Atome in Schritten von 5 ps für Ag<sub>9</sub>, deponiert mit 50 eV, vor einem festgehaltenen Hintergrund von C-Atomen. Zum Zeitnullpunkt befindet sich der Cluster in der Gasphase (nicht eingezeichnet). Die Größe der eingezeichneten Atome ist nicht maßstabsgerecht.

Um ein Maß für die Deformation des Ag<sub>9</sub>-Clusters bei der Deposition zu gewinnen, wurde die "Ausdehnung" des Clusters in z-Richtung als die maximale Distanz zwischen den z-Positionen der Ag-Atome des Clusters bestimmt. In Tab. 4-1 ist der Wert für die Gasphase (0 ps) sowie die Werte für die verschiedenen Depositionsenergien am Ende der Simulationsdauer (20 ps) angegeben.

Gasphase	3 eV	10 eV	20 eV	50 eV
5.034 Å	2.604 Å	2.503 Å	1.361 Å	0.44 Å

Tab.	4-1
------	-----

In der **Abb. 4-13** ist das Ergebnis graphisch dargestellt. Der Wert für die Gasphase ist links im Bild als Kreis, die Werte für die verschiedenen Depositionsenergien sind in schwarz eingezeichnet. Auffällig ist die bereits bei 3 eV Depositionsenergie auftretende geometrische Deformation des Clusters und der geringe Wert bei 50 eV Depositionsenergie, der impliziert, daß der Ag<sub>9</sub>-Cluster zweidimensional ist.



**Abb. 4-13**: Aufgetragen ist die maximale Distanz zwischen den Positionen der Ag-Atome des Ag<sub>9</sub>-Clusters in z-Richtung in Abhängigkeit von der Depositionsenergie. Der Wert für die Gasphase (Kreis) ist der Simulation zum Zeitpunkt 0 ps entnommen, die Werte für die verschiedenen Depositionsenergien (schwarz) gelten jeweils für das Ende der Simulationsdauer (20 ps).

### 4.3 Diskussion und Zusammenfassung

An Ag<sub>9</sub>/HOPG wurden 2PPE-Spektren für die Depositionsenergien 3, 10, 20, 50 und 60 eV bei 100 K Substrat-Temperatur aufgenommen. Die Spektren bei 10, 20, 50 und 60 eV besitzen eine ähnliche Form und energetische Lage. Sie sind, verglichen mit dem Spektrum bei 3 eV, zu niedrigerer Bindungsenergie verschoben und eher mit dem Spektrum für Ag<sub>8</sub>/HOPG (3 eV) vergleichbar.

In den zeitaufgelösten 2PPE-Spektren wurde eine Abnahme der Relaxationszeit zwischen 3 und 20 eV auf  $100 \pm 25$  fs und ein Anstieg bei 60 eV wieder auf  $341 \pm 8$  fs beobachtet.

Die Molekulardynamik-Simulationen zeigen, daß für Ag<sub>9</sub>-Cluster bei einer Depositionsenergie von 3 eV und einer Substrat-Temperatur von 100 K keine Diffusion auf der Oberfläche erfolgt. Eine laterale Diffusion des ganzen Clusters ist innerhalb der Simulationsdauer von 20 ps bei 10, 20 und 50 eV erkennbar. Darüberhinaus erfolgt eine geometrische Deformation aufgrund des Depositionsprozesses, die bei 50 eV zu einem zweidimensionalen Cluster führt.

Ag<sub>9</sub> läßt sich offenbar mit  $3 \pm 1$  eV Depositionsenergie stabil auf den Terassen des HOPG-Substrats deponieren. Die Diffusion des Clusters bei 10, 20 und 50 eV zeigt, daß die Simulation sehr gut mit früheren Beobachtungen über die Art der Diffusion von Silber-Clustern auf HOPG übereinstimmt [9,10,11]. Danach erfolgt die Diffusion nicht, indem einzelne Ag-Atome entlang der Cluster-Kante diffundieren, sondern die Konstellation der Ag-Atome im Cluster bleibt annähernd gleich, während sich der ganze Cluster über die Substrat-Oberfläche bewegt.

Die aufgenommenen 2PPE-Spektren zeigen, daß sich bei den höheren Depositionsenergien (bei 10, 20, 50, 60 eV) für Ag<sub>9</sub>/HOPG die Austrittsarbeit des Gesamtsystems erhöht. Die Charakteristika der Spektren zeigen, - daß verglichen mit den Experimenten bei geringer Depositionsenergie - kein Ladungstransfer zwischen den Ag<sub>9</sub>-Clustern und dem HOPG-Substrat feststellbar ist.

Die Ursachen für die auffälligen Änderungen des Ladungstransfer und der Relaxationszeiten in Abhängigkeit von der Depositionsenergie sind sowohl in der geänderten Morphologie des Adsorbats als auch in der speziellen Struktur des Substrats zu suchen.

HOPG besitzt eine Schichtstruktur, die in aufeinanderfolgenden ABAB....-Sequenzen angeordnet ist. Die eine Hälfte der hexagonal angeordneten C-Atome der Schicht (A) liegt über einem C-Atom in der darunterliegenden Schicht (B). Die andere Hälfte der C-Atome liegt über einem Loch-Platz der Schicht B und über einem C-Atom der übernächsten Schicht (A). Auf diese Weise beträgt der Abstand der Schichten 3.3539 Å und die Gitterkonstante in c-Richtung 6.708 Å [12].

Diese Struktur erzeugt ganz unterschiedliche Adsorptionsplätze für Ag-Adatome auf der Oberfläche des HOPG-Substrats. Die Adsorption über einem C-Atom der obersten Atomlage des Substrats, das nicht über einem C-Atom der darunterliegenden Schicht angeordnet ist, ist die Adsorption auf einem sog.  $\beta$ -Platz. Da es nicht an ein Atom der darunterliegenden Schicht gebunden ist, kann das C-Atoms mit einem Ag-Adatom hybridisieren. Dagegen besitzt das C-Atom an einem  $\alpha$ -Platz eine Bindung mit dem C-Atom der darunterliegenden Schicht, daher ist die Bindung zu einem Ag-Adatom schwächer. Die verschiedenen möglichen Adsorptionsplätze auf der HOPG-Oberfläche ( $\alpha$ -,  $\beta$ - , Loch-Platz und der Platz über einer Bindung) führen zu unterschiedlicher Bindungsenergie des Adsorbats und zu unterschiedlichem Ladungstransfer zwischen dem Adsorbat und dem Substrat [13].

Die Gitterkonstante in der Graphit-Ebene beträgt 2.462 Å [12], während der interatomare Abstand in freien Ag<sub>n</sub>- und Ag<sub>n</sub><sup>+</sup>-Clustern (n = 2 – 9) nahe 2.8 Å liegt, welches dem Abstand nächster Nachbarn im Silber-Festkörper entspricht [14]. Die Adsorption eines Ag-Clusters kann daher zur Deformation des Clusters oder zur Besetzung verschiedener Adsorptionsplätze durch den Cluster führen.

Bedingt durch die Deformation der Cluster bei höheren Depositionsenergien und möglicherweise auch durch die unmittelbar nach dem Aufprall erhöhte Mobilität könnte die Adsorption der Cluster an anderen Adsorptionsplätzen erfolgen, so daß sich die Hybridisierung zwischen den Orbitalen des Substrats und des Adsorbats ändert. In gleicher Weise kann sich der Ladungstransfer zwischen Cluster und Substrat in Abhängigkeit vom Adsorptionsplatz ändern.

Der zusätzliche Einfluß der Deformation der Cluster wird deutlich, wenn man die Relaxationszeiten von 10, 20, 50 und 60 eV Depositionsenergie pro Cluster vergleicht. Obwohl bei den vier verschiedenen Depositionsenergien kein Ladungstransfer beobachtet wird, unterscheiden sich die Relaxationszeiten erheblich. Es ist anzunehmen, daß die mit der Depositionsenergie zunehmende Deformation eine Verschiebung der Energieniveaus der Cluster verursacht. Auch wenn die Lage der Energieniveaus deformierter Cluster nicht bekannt ist, ist anzunehmen, daß durch die nahezu zweidimensionale Form der Cluster bei 50 eV und 60 eV Depositionsenergie die Anzahl der Zustände in z-Richtung abnimmt. Dies könnte die Hybridisierung zwischen den Orbitalen des Adsorbats und denen des Substrats vermindern. Darüber hinaus kann auch der - unbekannte - genaue Abstand der adsorbierten Cluster von den Atomen der obersten Atomlage des Substrats einen Einfluß auf die Hybridisierung besitzen.

**Abb. 4-14** zeigt, daß der Einfluß, den eine erhöhte Depositionsenergie auf die Wechselwirkung zwischen Cluster und Substrat ausübt, auch von der Cluster-Größe abhängt. Bei der Deposition von Ag<sub>3</sub> mit geringer kinetischer Energie zeigten die experimentellen Resultate in Kap. 2 keinen feststellbaren Ladungstransfer. Dagegen ist bei einer Depositionsenergie von ca. 20 eV ein Ladungstransfer anzunehmen (siehe Kap. 2). Dieses – verglichen mit Ag<sub>9</sub> - genau entgegengesetzte Verhalten wird davon abhängen, wo und in welcher Form die Cluster bei der jeweiligen Depositionsenergie auf dem Substrat adsorbieren.



Abb. 4-14: 2PPE-Intensität in Abhängigkeit von der kinetischen Energie der Photoelektronen für HOPG (Kreise) und 0.16 ML Ag<sub>3</sub>/HOPG, deponiert mit 20 eV (schwarze Punkte).  $E_{kin,max}$  von Ag<sub>3</sub>/HOPG ist um 1 ± 0.1 eV zu höheren Bindungsenergien verschoben (gleiche Abb. wie Abb. 2-9).

#### Literatur

- R. Neuendorf vom Nanoscale Physics Research Laboratory, School of Physics and Astronomy, University of Birmingham und R. Smith vom Department of Mathematical and Physical Science, Loughborough University
- [2] M.-H. Schaffner, J.-F. Jeanneret, F. Patthey, W.-D. Schneider: An ultrahigh vacuum sputter source for in situ deposition of size-selected clusters: Ag on graphite. J. Phys. D 31 (1998), 3177
- [3] R. Smith, K. Beardmore: *Molecular dynamics studies of particle impacts with carbon-based materials.* Thin Solid Films **272** (1996), 255
- [4] J. R. Hahn, H. Kang: Vacancy and interstitial defects at graphite surfaces: Scanning tunneling microscopic study of the structure, electronic property, and yield for ion-induced defect creation. Phys. Rev. B 60 (1999), 6007
- [5] D. W. Brenner, Phys. Rev. B 42 (1990), 9458
- [6] G. J. Ackland, G. Tichy, V. Vitek, M. W. Finnis, Philos. Mag. A 56 (1987), 735
- [7] H. Rafii-Tabar, H. Kamiyama, M. Cross: *Molecular dynamics simulation of adsorption of Ag particles on a graphite substrate.* Surf. Sci. **385** (1997), 187
- [8] Berendsen et al., J. Chem. Phys. 81 (1984), 3684
- [9] G. M. Francis, L. Kuipers, J. R. A. Cleaver, R. E. Palmer: *Diffusion controlled growth of metallic nanoclusters at selected surface sites.* J. Appl. Phys. **79** (1996), 2942
- [10] E. Ganz, K. Sattler, J. Clarke: Scanning tunneling microscopy of Cu, Ag, Au and Al adatoms, small clusters, and islands on graphite. Surf. Sci. 219 (1989), 33
- [11] C. Binns, S. C. Bayliss: Growth of silver particles on graphite studied by optical scattering. Surf. Sci. 214 (1989), 165
- [12] M. S. Dresselhaus, R. Kalish: Ion Implantation in Diamond, Graphite and Related Materials. Springer-Verlag (1992)
- [13] D. M. Duffy, J. A. Blackman: The energy of Ag adatoms and dimers on graphite. Surf. Sci. 415 (1998), L1016
- [14] V. Bonačić-Koutecký, L. Češpiva, P. Fantucci, J. Koutecký: Effective core potential-configuration interaction study of electronic structure and geometry of small neutral and cationic Ag<sub>n</sub> Clusters: Predictions and interpretation of measured properties. J. Chem. Phys. 98 (1993), 7981