

Pt_{0.5}Ni_{0.5}{110} 표면의 편석과 질서

서지근¹ · 강석태² · 한원근³

¹한국표준과학연구원, 압력진공연구실, ²연세대학교, 물리학과, ³홍익대학교, 물리학과
(1995년 1월 27일 접수)

Segregation and Order on Pt_{0.5}Ni_{0.5}{110} Surface

Jikeun Seo¹, S. -T. Kang² and W. K. Han³

¹Pressure-Vacuum Lab., Korea Research Institute of Standards and Science,
²Department of Physics, Yonsei University, ³Department of Physics, Hong-Ik University
(Received January 27, 1995)

요 약 - Pt_{0.5}Ni_{0.5}{110} 표면에서의 편석 역전과 조성상 질서를 표면 효과를 고려한 간단한 Ising 모형을 이용하여 연구하였다. 합금 표면의 성질을 질서 상태의 해석적 계산으로 정성적으로 이해하였으며, 몬테 카를로 시뮬레이션으로 실험 결과들과 정량적으로 비교하였다. 본 연구 결과의 일부는 실험에 의해 검증되기를 기다린다.

Abstract - We studied the segregation reversal and compositional order on Pt_{0.5}Ni_{0.5}{110} surface using a simple Ising model which includes the surface effects. We were able to understand the properties of alloy surfaces qualitatively by analytical calculation on the ordered phases and to compare with the experimental data quantitatively by Monte Carlo simulation. Some of our results await the further experimental tests.

1. 서 론

PtNi 합금은 온도와 조성비에 따라 화학적 질서-무질서 상전이가 일어나는 물질이다[1, 2]. 또한 표면의 방향에 따라 편석되는 물질이 달라지는 실험 결과에 의해 많은 관심을 끌고 있다. 최근에 행해진 단결정 PtNi 합금에 대한 실험 결과에 의하여 {100}와 {111} 표면의 경우는 Pt가 편석되나, {110} 표면에서 Ni이 편석됨이 알려졌다[3, 4]. 측정 기술의 발전에 힘입어 표면은 한 원자가 풍부하고 다음 면은 다른 원자가 풍부한 감쇄 진동 형태의 편석임이 알려졌다[4-7]. 원자들의 크기, 승화열, 표면 에너지 등 몇가지 편석을 유발하는 요인들로 여러가지 합금의 편석을 예측한 초기의 이론적 시도들은 이러한 PtNi 합금의 독특한 편석 현상을 설명하는 데 적합하지 않았다[3].

최근의 tight binding Ising model(TBIM)[8]이나 embedded atom method(EAM)[9] 등과 같이 전자 구조의 계산으로 출발한 연구들은 PtNi{110} 면에서의 편석 역전 현상 등의 PtNi 합금 표면의 독특한 성질을 보일 수 있었다. 그러나 이들 결과들도 PtNi 합금의 편석 현상에 대한 세부적인 특징들을 보여주기는 아직 부족하다. 특히 편석의 온도 의존성이나 질서-무질서 상전이 현상과의 관련성 등 편석 현상의 구조를 파악하는 데에는 문제점이 있다. 이는 평균장 근사(MFA)와 같은 높은 온도에서의 근사를 사용하거나 화학적 질서의 편석에의 영향을 고려하지 않는 점에서 기인한다고 볼 수 있다. Cu₃Au 합금의 표면 편석과 질서-무질서 상전이 현상을 보여주는 데 성공한 Cluster Variation Method(CVM) 방법에 의한 연구[10]는 이러한 문제점들에 대해서는 PtNi의 경우에 적용되지 않았고, 편석의 표면 방향에 대한 의존성이나 화학적

질서에 대한 편석의 역할을 보여주지는 못하고 있다.

본 연구에서는 PtNi 합금의 {110} 표면의 여러 성질을 표면 편석 현상과 질서-무질서 상전이 현상의 관계를 규명하여 체계적으로 파악하려 한다. 표면의 효과를 고려한 간단한 Ising 모형을 통하여 표면에 나타나는 여러 가지 세부적 현상을 몬테 카를로 시뮬레이션에 의한 계산으로 재현하고자 한다. 상호작용 계수와 편석력의 표면에서의 역할이 고찰되었으며, 특히 상전이 온도 부근에서의 편석 현상과 표면 질서의 온도 의존성이 연구되었다.

2. 모형 해밀토니안

PtNi와 같은 치환형 합금의 성질을 연구하기에 적당한 Ising 모형을 선택하였고[11], 다음과 같이

$$\begin{aligned}
 H = & 1/2 \sum_n J_b \sigma_i^{(n)} \sigma_j^{(n)} \\
 & + 1/2 \sum_n J_{11} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(1)} + 1/2 \sum_n J_{12} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(2)} \\
 & + 1/2 \sum_n J_{13} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(3)} \\
 & + \sum_i h^{(1)} \sigma_i^{(1)} + \sum_i h^{(2)} \sigma_i^{(2)} + \sum_i h^{(3)} \sigma_i^{(3)}
 \end{aligned} \quad (1)$$

로 놓았다. 여기서 Pt 또는 Ni 원자들로 이루어진 평면이 {110} 표면에 평행하게 구성된 격자가 사용되었고, nn은 최인접 원자 쌍을 의미하며, $\sigma_i^{(n)}$ 은 n번째 층의 i번째 격자 위치에서의 pseudo-spin으로 +1이면 Pt 원자가 -1이면 Ni 원자가 존재함을 의미한다. 상호작용 계수의 값은 덩어리 영역에서 격자의 위치에 무관하다고 볼 수 있으므로 고정된 값인 J_b 로 놓았다. {110} 표면에 있는 원자의 최인접 격자가 세째 층에 까지 놓여 있음을 고려하여 덩어리와 구별되는 표면 영역을 셋째 층까지로 보았고, 상호작용 계수도 셋째 층까지의 결합 계수인 J_{11} , J_{12} , J_{13} 들은 덩어리에서의 값 J_b 와 다르게 놓았다. 다음으로 h_i 는 편석력으로 표면 근방과 덩어리에서의 크기 차이 만이 의미가 있으므로 표면 근방의 영역에서만 부가적으로 작용하는 장과 같은 역할을 한다. 이 경우도 격자가 표면(h_1), 둘째 층(h_2), 세째 층(h_3)에 있을 때의 값만을 고려하였다. 이 해밀토니안은 TBIM 모형이나 CVM 방법에서 사용한 것과 같은 Ising 형태이지만 상호작용 계수를 표면의 영향을 고려하여 구분한 점에 있어서 차이가 있다. 이러한 해밀토니안으로 부터 유한 온도에서의

물리량을 해석적으로 계산하는 것은 완전한 무질서 상태와 완전한 질서를 가정한 경우에만 가능하다. 양 극단에서의 계산으로 부터 유한 온도에서의 성질을 유추하는 것이 불완전하므로 몬테 카를로 시뮬레이션에 의한 계산은 의미가 있다.

3. 기저 질서

단결정 Pt_xNi_{1-x}의 기저 질서에 대해서는 많은 계산과 실험을 통해서 조성비가 50%인 경우 L₁₀-질서임이 확인되었다. 반면 표면이 있는 경우 표면 원자의 bond-break, 편석력의 존재, 그리고 frustrated bond의 영향[12]으로 계산에 어려움이 있고 아직 실험적으로도 밝혀진 것이 거의 없다[13]. 표면이 완전한 질서 상태인 덩어리의 단면과 같다는 가정 아래에서는 {110} 단면을 갖는 PtNi 단결정에서 나타나는 층별 질서는 세가지 형태가 있다. 이들은 Pt의 층별 농도(c_1 , c_2 , c_3 , ...)가 각각 (0%, 100%, 0%, ...; 질서-1), 또는 (100%, 0%, 100%, ...; 질서-2), 또는 (50%, 50%, 50%, ...; 질서-3)이고, 그 배열은 그림 1에 보였다. 이들은 같은 덩어리 질서를 갖지만 층별 질서의 관점에서 보면 각기 다른 형태이며, 특히 표면의 농도로 보면 전혀 다르다.

세가지 층별 질서들이 서로 다른 평균 에너지 값을 갖는 표면층, 둘째 층, 셋째 층의 원자 당 평균 에너지만을 합하여 비교해 보면 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 e^{(질서-1)} &= J_{11} - 4J_{12} + J_{13} - 3J_b - \Delta h \\
 e^{(질서-2)} &= J_{11} - 4J_{12} + J_{13} - 3J_b + \Delta h \\
 e^{(질서-3)} &= -J_{11} - J_{13} - 3J_b
 \end{aligned} \quad (2)$$

여기서 $\Delta h = h_1 - h_2 + h_3$ 이다. $\Delta h > 0$, $2(J_{11} + J_{13}) < 4J_{12} + \Delta h$ 인 경우 질서-1이 기저 질서로 표면이 Ni 층으로 시작되나, $\Delta h < 0$, $2(J_{11} + J_{13}) < 4J_{12} - \Delta h$ 인 경우 질서-2가 기저 질서로 Pt 층으로 시작된다. 또한 $2(J_{11} + J_{13}) > 4J_{12} + |\Delta h|$ 인 경우는 질서-3이 기저 질서가 된다. 단 $\Delta h = 0$ 인 경우는 기저 질서가 계수 조건에 따라 여러 가지 형태로 축퇴된다. 저온에서의 배열에 관한 정확한 실험 결과 또는 이론적 예측이 없으나, 기존의 실험 결과로 부터 적절한 예상을 할 수 있다. 즉 표면에 Ni 원자가 대량으로 편석된 점으로 보아 저온에서는 질서-1의 층별 구조를 이룰 것이 예상된다.

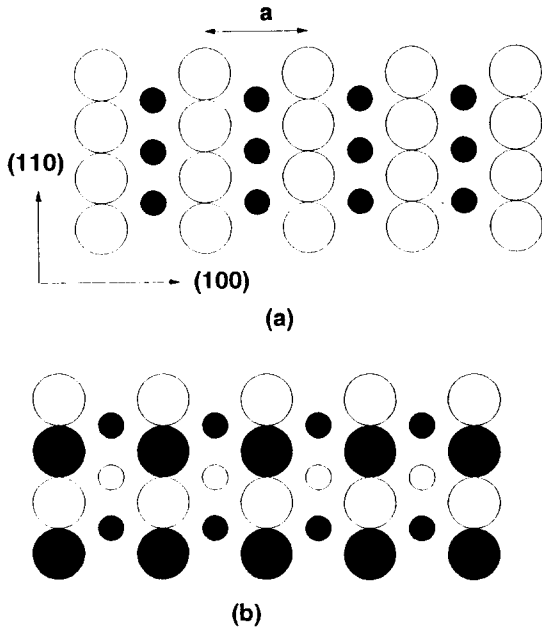


그림 1. 단결정 PtNi{110} 표면에서의 원자 배열의 개략도이다. 큰 원은 표면 층의 원자를 작은원은 표면 바로 아래 층의 원자를 나타내며 하얀 원과 까만 원으로 원자의 종류를 표시하였다. (a) 질서-1 또는 질서-2, (b) 질서-3.

본 연구에서는 이를 기준 구조로 삼았고, 이를 확인하기 위해 다른 층별 질서를 기준 구조로 삼은 계산 결과는 기존 실험 결과를 잘 해석하지 못 하였음을 부연한다.

4. 몬테 카를로 시뮬레이션

유한 온도 특히 상전이 온도 근방에서의 합금의 덩어리와 표면의 물리적 성질을 계산하기 위해 몬테 카를로 시뮬레이션 방법이 사용되었다. 10×10 또는 20×20 크기의 고정된 격자 면이 97층 놓여있는 시뮬레이션 격자 단위가 사용되었고, 면 방향으로 만 주기적인 경계 조건이 사용되었다. 따라서 양쪽 끝 층이 표면이며, 각 층의 원자수는 층별 농도와 질서에 따라 선택되었다. Kawasaki 동력학과 Metropolis 엘 고리들을 이용하여, 각 원자들의 전체 숫자를 고정 시킨 정준 앙상블을 사용하였다. 주어진 온도에서 열역학적 평형을 이루기 위해 처음 5000~20000 Monte Carlo Step(mcs)은 버렸고, 통계 처리에 20000~

25000 mcs 정도를 사용하였다. 상전이 온도 근처에서 나타나는 평형 상태에 도달하는 시간의 과대화를 피하기 위하여[13] 시뮬레이션은 낮은 온도에서 기저 배열로 부터 시작하여 점차 온도가 올려지는 순서로 시행되었다. 각 온도에서 비열(C_V), 층별 장거리 질서(η_i)를

$$C_V = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{Nk_B T^2} \quad (3)$$

$$\eta_i = (C_A^i - C_A^B) / N_{(i)} \quad (4)$$

로 계산하였고, Pt 원자의 층별 농도(c_i)도 계산하였다. 여기서 $C_A^i (C_B^i)$ 는 A(B)-sublattice에 A 원자의 개수이며 $N_{(i)}$ 는 i 번째 층에서 A 원자의 수를 말한다.

시뮬레이션에서 사용된 해밀토니안의 계수는 경험적인 방법을 통하여 결정하였다. 덩어리에서의 상호작용 계수는 $J_b = 45 \text{ meV}$ 로 결정되었고, 이를 이용하여 시뮬레이션한 결과 PtNi 합금의 상전이 온도인 910 K를 재현할 수 있었다. 다른 상호작용 계수(J_{11}, J_{12}, J_{13})나 편석력(h_1, h_2, h_3)은 본 연구의 수치 오차 한계 내에서는 상전이 온도에 큰 영향을 주지 않는다. 그러나 뒤에 설명하지만 편석량이나 질서도에는 큰 영향을 준다. 편석력이 작용하는 경우, 한 물질을 표면에 풍부하게 하려는 편석력의 영향으로 표면 근방이 덩어리의 단면 형태와 전혀 다른 안정된 질서를 만들 가능성이 있다. 이를 확인하기 위하여 낮은 온도에서 수행한 시뮬레이션에 의하면 표면과 덩어리가 상이한 질서를 갖는 안정된 층별 질서는 나타나지 않는 것을 볼 수 있었다. 여기서 사용한 기저 상태의 층별 질서 형태는 표면이 Ni 원자만으로 구성되고 다음 층이 Pt 원자만으로 구성된 층들이 교대로 쌓여 있는 질서-1 형태의 배열이다. 이를 위하여 먼저 편석력은 $h_1 = -80 \text{ meV}$, $h_2 = -75 \text{ meV}$, $h_3 = 10 \text{ meV}$ 로 선택하였다. 이를 보면 h_1 과 h_2 가 음수로 표면 근처에 Pt이 편석될 가능성이 많다. 그러나 $\Delta h > 0$ 인 조건이 Ni 층이 표면층이 되게 함에 유의하여야 한다.

5. 결 과

먼저 $J_{11} = J_{13} = J_b$, $J_{12} = 2J_b$ 로 계수화하여 질서-1이 기저 질서가 되도록 시뮬레이션을 수행하였다. 그림 2에서 보면 상전이 온도인 910K 이전에는 합금 전

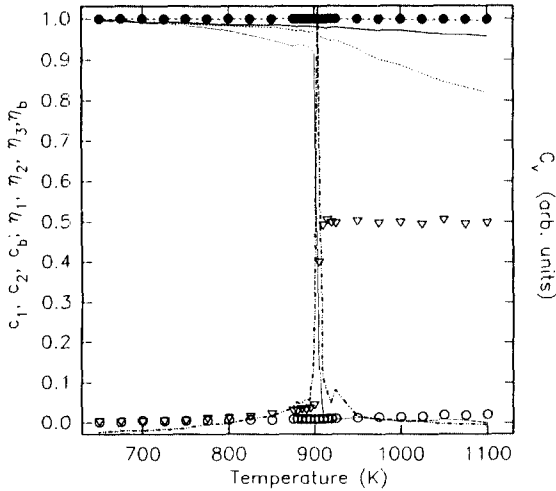


그림 2. 온도의 변화에 따른 층별 Pt 농도(c_1 ; 열린 원: c_2 ; 닫힌 원: c_b ; 열린 역삼각형)와 층별 LRO 값(η_1 ; 실선: η_2 ; 굵은 점선: η_3 ; 점선: η_b ; 가는 점선), 그리고 비열(이점 채선)을 보여 준다. 여기서 사용한 계수는 $J_1=45$ meV, $J_{11}=J_{13}=J_b$, $J_{12}=2J_b$, $h_1=-80$ meV, $h_2=-75$ meV, $h_3=10$ meV이며 $20 \times 20 \times 97$ 격자가 사용되었다.

체가 층별 농도나 질서도가 온도에 따른 변화 없이 질서-1의 기저 상태 배열을 잘 유지하고 있다. 그러나 온도가 상승하여 910K를 넘어서면 두 원자가 섞여 덩어리 영역에서 농도가 50%로 조성비와 같아지고 장거리 질서가 급격히 사라져서 무질서 상태로 전이하는 것을 볼 수 있으며, 이 온도 근처에서 비열값의 최대치가 나타나는 것을 볼 수 있다. 이것은 이미 여러 가지 실험과 이론을 통해 알려진 덩어리 PtNi 합금의 불연속적인 질서-무질서 상전이 현상이며, 표면과 편석력이 있는 계에서도 잘 재현되는 것을 볼 수 있다.

상전이 온도 이후에서 Pt_{0.5}Ni_{0.5}{110}은 덩어리 영역이 조성비인 50%를 유지함에 비해 상당한 온도까지 거의 100%의 Ni 원자를 표면 층에 Pt 원자를 다음 층에 분포시키는 편석 역전 현상을 보여 준다. 이때 표면 근방에는 층별 질서도가 덩어리 영역과 다르게 급격하게 감소하지 않고 남아 있는 것을 볼 수 있다. 이러한 표면 근방에 남아 있는 질서는 표면 근처의 조성비를 표면에서 고농도의 Ni와 둘째 층에서 고농도의 Pt로 기저 상태와 유사한 형태로 유지시킨다. 따라서 Pt_{0.5}Ni_{0.5}{110} 합금의 표면 편석 현상은 이와 같이 표면 근방과 덩어리 영역의 질서 정도의 차이

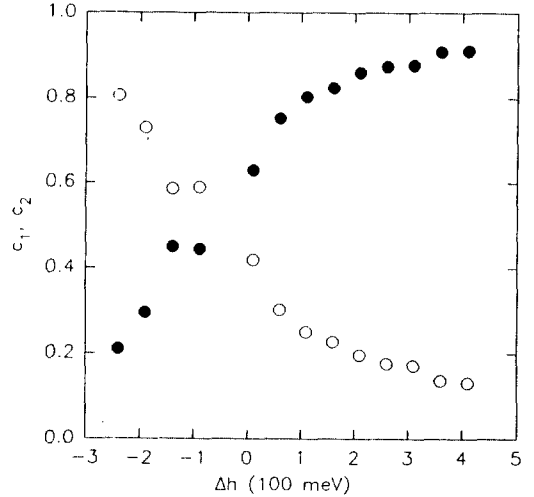


그림 3. 고온 1800K에서 $\Delta h(h_1)$ 의 변화에 따른 표면 근방의 층별 Pt 농도(c_1 ; 열린 원: c_2 ; 닫힌 원)을 보여준다. 여기서 사용한 계수는 $J_1=45$ meV, $J_{11}=J_{13}=J_b$, $J_{12}=2J_b$, $h_2=-75$ meV, $h_3=10$ meV이며 $20 \times 20 \times 97$ 격자가 사용되었다.

에서 기인한 현상으로 볼 수 있다. 이를 확인하기 위하여 편석력이 없는 경우를 시뮬레이션해 보았으나 앞의 결과와 큰 차이를 보이지 않았다. 즉 상전이 온도 이후의 표면과 덩어리의 질서 정도 차이에 의해 표면 편석 현상이 나타날 수 있음을 볼 수 있다. 단 이 때 표면이 덩어리와 다르게 취급된 점은 깨어진 결합, frustrated 결합에 의한 효과 뿐이다[16]. 단, 세 가지 층별 질서가 모두 기저 질서이므로 주어진 시간 내의 시뮬레이션 결과는 초기 배열에 의존하였을 가능성이 있다는 점에 주의를 요한다. 편석량은 편석력의 세기는 물론 표면 근처 상호 작용 계수의 크기에 의존하는 것을 보이고 있다. 그림 3에 보인 것처럼 1800 K의 고온에서 편석력 h_2 와 h_3 를 고정시키면서 h_1 의 세기를 변화시키면 표면에 편석되는 정도는 $\Delta h(=h_1 - h_2 + h_3)$ 에 비례한다. 이 때는 덩어리 전체가 완전히 무질서하므로 편석에 미치는 편석력의 역할이 확실하게 보여 진다. 어느 경우나 표면 층과 다음 층은 서로 다른 원자가 풍부한 것이 관찰되었다.

상전이 온도 부근에서 표면 편석의 역전 현상에 상호 작용의 역할이 편석력의 존재보다 더 중요한 요소로 생각된다. 질서-1 형태가 유지되는 조건 아래에서 표면, 둘째층, 세째층의 유효 상호작용 세기는 각각 $J^{(1)}=(-2J_{11}+4J_{12}-J_{13})/4$, $J^{(2)}=(4J_{12}+J_b)/4$, $J^{(3)}=$

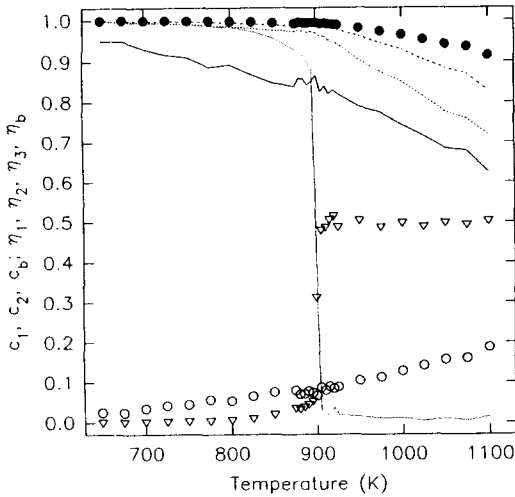


그림 4. 온도의 변화에 따른 층별 Pt 농도(c_1 ; 열린 원: c_2 ; 닫힌 원: c_b ; 열린 역삼각형)와 층별 LRO 값(η_1 ; 실선: η_2 ; 굵은 점선: η_3 ; 점선: η_b ; 가는 점선)을 보여 준다. 여기서 사용한 계수는 $J_1=45$ meV, $J_{11}=J_{13}=J_b$, $J_{12}=1.5J_b$, $h_1=-80$ meV, $h_2=-75$ meV, $h_3=10$ meV이며 $20 \times 20 \times 97$ 격자가 사용되었다.

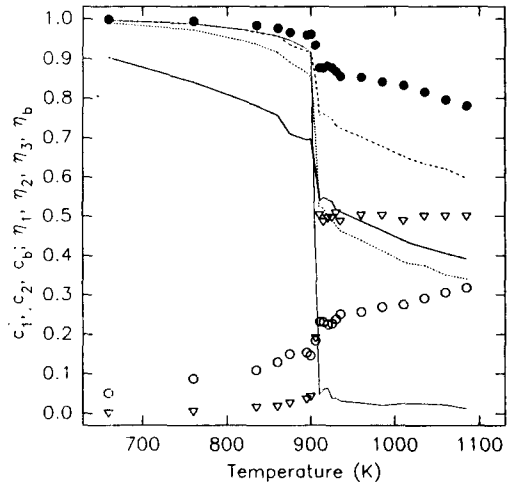


그림 5. 온도의 변화에 따른 층별 Pt 농도(c_1 ; 열린 원: c_2 ; 닫힌 원: c_b ; 열린 역삼각형)와 층별 LRO 값(η_1 ; 실선: η_2 ; 굵은 점선: η_3 ; 점선: η_b ; 가는 점선)을 보여 준다. 여기서 사용한 계수는 $J_1=45$ meV, $J_{11}=J_{12}=J_{13}=2J_b$, $h_1=-80$ meV, $h_2=-75$ meV, $h_3=10$ meV이며 $20 \times 20 \times 97$ 격자가 사용되었다.

$(-J_{13} + 5J_b)/4$ 이다. 앞의 경우에 $J^{(1)}/J_b=5/4$, $J^{(2)}/J_b=9/4$, $J^{(3)}/J_b=1$ 이다. Ising 모형에서 일반적으로 보다 큰 상호작용은 높은 상전이 온도를 만든다. 따라서, 표면 층의 유효 상호작용의 세기가 덩어리 층에 비해 크다는 것은 표면이 덩어리에 비해 보다 높은 온도에서 무질서해지는 것을 의미하는 것으로 볼 수 있다. 표면 근방과 덩어리의 질서 정도의 차이는 이러한 표면과 덩어리의 결합력 차이에서 기인한다. 또한 상전이 온도 약간 이후에도 질서를 유지하려는 이러한 경향이 표면에 Ni 원자가 풍부한 표면 편석 역전 현상의 원인으로 추정된다.

편석량에 관한 실험 결과를 정량적으로 설명하기 위하여 해밀토니안의 계수를 바꾸어 보았다. 즉 본 연구에서 사용한 계수들인 $J_{11}=J_{13}=J_b$, $J_{12}=3J_b/2$ 인 경우 유효 상호작용 계수들의 비는 각각 $J^{(1)}/J_b=3/4$, $J^{(2)}/J_b=7/4$, $J^{(3)}/J_b=1$ 이며, 또한 $J_{11}=J_{12}=J_{13}=2J_b$ 인 경우는 이들이 $J^{(1)}/J_b=1/2$, $J^{(2)}/J_b=9/4$, $J^{(3)}/J_b=3/4$ 이다. 각 층별로 따로 계산한 평균 상호 결합 세기가 각층의 질서도와 완전히 비례하지는 않지만 그림 4와 5에 각각 보인 결과는 결합의 세기와 질서도가 일정한 관계가 있음을 잘 보여 주고 있다. 또한 편석량도

표면과 덩어리의 질서 차이에 의존하는 것을 보여 주고 있다. 다른 방향인 $\{100\}$ 나 $\{111\}$ 표면과의 차이점은 표면이 거의 Ni 원자로 채워진 편석 역전 현상이 나타난다는 점이다. 여기서 h_1 이 음수인 것은 Pt의 표면으로 편석됨을 의미하므로 편석 역전 현상은 $\{110\}$ 표면이 가지는 개방된 성격에도 기인한다고 여겨진다. 즉 $\{110\}$ 표면의 경우는 둘째 층이 열려있어 둘째 층까지도 표면 층처럼 행동하며, 표면 원자의 최인접 원자가 셋째 층까지 놓여 있는 특징은 편석 역전에 기여하고 있다.

6. 결 론

최인접 원자들 사이의 상호작용까지 만을 고려한 Ising 모형으로 $Pt_{0.5}Ni_{0.5}\{110\}$ 합금의 질서-무질서 상전이 현상과 표면 편석 현상이 잘 재현될 수 있음을 보였다. 완전한 질서를 가정한 해석적 계산에 의한 추론을 유한 온도에서 적용하는 것이 문제가 있으나 기저 질서가 상전이 온도 이전에 까지 지속된다는 일반적인 경향이 보여지고 있다. 인접 원자와의 결합 갭수의 비만으로 상전이 온도와의 관계를 추론한 것

이나[13], 완전히 무질서한 높은 온도에서 이들의 관계를 MFA 방법을 사용한 연구[8]에 비해 본 연구에서의 해석적 계산은 frustrated bond의 영향이나 질서 형태가 고려되었다는 점에서 보다 적절한 계산 방법으로 볼 수 있다. PtNi{110}의 편석 현상은 덩어리의 질서-무질서 상전이 온도 이후에 나타나며, 표면 영역과 덩어리 영역 사이의 질서 정도의 차이에 기인하는 것을 확인하였다. {110} 표면 근방은 한 원자로 구성된 층이 교차하는 질서를 갖기 때문에 층별 농도가 질서의 정도를 나타내게 된다. 따라서 표면 근방의 크게 진동하는 농도비를 본 LEED나 LEIS에 의한 실험 결과는 시뮬레이션의 결과와 잘 일치하는 것으로 볼 수 있다[5-7]. 또한, 표면에 Pt를 올려 놓으려는 큰 편석력이 작용함에도 불구하고 평형 상태에서 편석 역전이 나타나는 것은 편석되는 물질의 종류나 양이 편석력에만 의존하는 것이 아니라 결합력에 의존하며, 질서-무질서 현상도 편석량에 따라 달라지는 상호 의존성을 볼 수 있었다. 이는 표면 효과를 포함한 상호작용과 편석력을 고려하여 보았다. 보다 더 정확하게 온도에 따른 편석과 질서도의 변화를 측정하는 실험이 요구됨을 마지막으로 언급한다.

감사의 글

이 논문은 '94 홍익대학교 교내 연구비 및 1994년도 교육부 기초과학육성연구비(BSRI-94-2440)의 지원에 의해 연구되었음.

참고문헌

1. F. Ducastelle, *Order and Phase Stability in Alloys*, (North Holland, Oxford, 1991); M. C. Cadeville, J. M. Sanchez, Pierron-Bohnes and J. L. Moran-Lopez, in *Structural and Phase Stability of Alloys*, edited by J. L. Moran-Lopez, F. Mejia-Lira and J. M. Sanchez (Plenum, New York, 1992).
2. C. E. Dahmani, M. C. Cadeville, J. M. Sanchez, J. L. Moran-Lopez, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1208 (1985); C. E. Dahmani, M. C. Cadeville and V. Pierron-Bohnes, *Acta Metall.* **33**, 369 (1985).
3. Y. Gauthier and R. Baudoing, in *Surface Segregation Phenomena*, edited by P. A. Dowben and A. Miller (CRC Press Inc., Boca Raton, 1990).
4. D. Dufayard, R. Baudoing and Y. Gauthier, *Surf. Sci.* **233**, 223 (1990).
5. P. Weigand, P. Novacek, G. van Husen, T. Neidhart and P. Varga, *Surf. Sci.* **269/270**, 1129 (1992).
6. Y. Gauthier, R. Baudoing, M. Lundburg and J. Rundgren, *Phys. Rev.* **B35**, 7867 (1987).
7. J. C. Bertolini, J. Massardier, Ph. Ruiz and B. Tardy, *Surf. Sci.* **211/212**, 1053 (1989); M. Fallavier, M. Benmansour, B. Hjorvarsson, J. P. Thomas, M. Abon, H. J. Atli and J. C. Bertolini, *Surf. Sci.* **311**, 24 (1994).
8. G. Treglia and B. Legrand, *Phys. Rev.* **B35**, 4338 (1987); B. Legrand, G. Treglia and F. Ducastelle, *Phys. Rev.* **B41**, 4422 (1990).
9. S. M. Foiles, *Phys. Rev.* **B32**, 7685 (1985); M. Lundberg, *Phys. Rev.* **B36**, 4692 (1987); J. Tersoff, *Phys. Rev.* **B42**, 10965 (1990).
10. J. M. Sanchez and J. L. Moran-Lopez, *Phys. Rev.* **B32**, 3354 (1985); J. M. Sanchez and J. L. Moran-Lopez, *Surf. Sci.* **157**, L297 (1985); Y. Teraoka, *Surf. Sci.* **232**, 193 (1990); Y. Teraoka, *Surf. Sci.* **235**, 249 (1990); Y. Teraoka, *Surf. Sci.* **242**, 113 (1991).
11. Jikeun Seo, S. -T. Kang, and W. K. Han, *Jour. Korean Phys. Soc.* **26**, 388 (1993).
12. 체심 입방 결정의 특징으로 12 개의 최인접 격자 중에서 8 개만이 반자성적인 결합을 할수 있으므로, 나머지 4 개의 결합은 frustrated되어 있다.
13. W. Schweika, K. Binder and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3321 (1991); D. P. Landau and K. Binder, *Phys. Rev.* **B41**, 4633 (1990).
14. K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1988); D. W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1990).