

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЛОКАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ $\text{Si}(100)2 \times 1$ С СУБМОНОСЛОЙНЫМИ ПЛЕНКАМИ Ва

Г. В. Бенеманская\*, Д. В. Дайнека, Г. Э. Франк-Каменецкая<sup>а</sup>

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия

<sup>а</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
198013, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 14 апреля 1998 г.

Впервые проведены исследования электронной структуры и ионизационной энергии для системы  $\text{Ba}/\text{Si}(100)2 \times 1$  как функций субмонослойного покрытия. Установлено, что в спектре поверхностных состояний существует энергетическая щель и интерфейс  $\text{Ba}/\text{Si}(100)2 \times 1$  имеет полупроводниковый характер вплоть до 1.5 монослоев Ва. Обнаружены две поверхностные зоны, индуцированные адсорбцией Ва. Эволюция спектра при увеличении степени покрытия Ва указывает на существование двух неэквивалентных «адсорбционных мест», которые различаются по энергии связи с атомами Ва на 0.11 эВ. Определено, что развитие зон, индуцированных Ва, заканчивается при покрытии, соответствующем минимуму ионизационной энергии и близком к одному монослою. Адсорбционная связь имеет преимущественно ковалентный характер.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование структурных и электронных свойств адсорбированных металлических покрытий на поверхностях кремния имеет как фундаментальное, так и прикладное значение, которое определяется перспективой использования данных систем в нанотехнологии. В связи с этим особый интерес представляет изучение на атомном уровне взаимодействий активных оборванных связей различных реконструированных поверхностей кремния с атомами металлов.

Среди явлений на поверхности полупроводников наименее исследованы изменения спектра поверхностных состояний в процессе адсорбции, корреляция структурных и электронных свойств, а также характер адсорбционной связи. Адсорбция металлов может вызывать изменение электронных свойств поверхности, индуцируя появление новых поверхностных состояний металлического или полупроводникового типа. В результате формирующийся интерфейс либо сохраняет исходный характер проводимости подложки, либо изменяет его. В связи с этим повышенный интерес вызывает вопрос о приоритетном влиянии адсорбата или подложки на электронную структуру ультратонких интерфейсов. Так, исследования последних лет показали, что адсорбция Cs на реконструированной поверхности  $\text{Si}(111)7 \times 7$  приводит к образованию ультратонких интерфейсов, имеющих металлический характер поверхностной проводимости [1–3]. Качественно иная ситуация наблюдается при адсорбции Ва на той же поверхности. Обнаружено, что незначительная концентрация адатомов Ва, менее чем 0.2 монослоя, на поверхности  $\text{Si}(111)7 \times 7$  приводит к разрушению металлической проводимости подложки,

\* E-mail: benem@optun.ioffe.rssi.ru

и интерфейс имеет полупроводниковый характер [1]. Данные исследования показывают, что в случае адсорбции металлов на поверхности  $\text{Si}(111)7 \times 7$  доминирующая роль в процессе формирования электронных свойств границы раздела металл—полупроводник принадлежит адсорбату.

Димерно-реконструированная поверхность  $\text{Si}(100)2 \times 1$  имеет две активные оборванные связи на димер, и их концентрация  $n = 6.78 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  более чем в два раза превосходит концентрацию оборванных связей на поверхности  $\text{Si}(111)7 \times 7$  [4]. Поэтому следует ожидать существенных различий в адсорбционных свойствах данных поверхностей. В настоящее время большинство экспериментальных и теоретических исследований подтверждают модель асимметричных димеров для реконструированной поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ . В рамках данной модели атомы из соседних атомных рядов на идеальной поверхности  $\text{Si}(100)1 \times 1$  при реконструкции образуют димеры, понижая тем самым число оборванных связей в два раза. Каждый атом димера имеет одну оборванную связь. Образовавшиеся димеры являются асимметричными, наклонными, в связи с чем происходит частичная передача заряда от нижнего атома димера к верхнему. Такая релаксация сопровождается перегибридизацией поверхностных связей и перераспределением поверхностного заряда. В результате электронная структура поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$  имеет полупроводниковый характер, тогда как в случае симметричных димеров активная оборванная связь каждого атома частично заполнена одним электроном, что должно было бы приводить к электронной структуре металлического типа [4–6]. Атомарно-чистая поверхность  $\text{Si}(100)2 \times 1$  имеет три поверхностных состояния,  $S_1$ ,  $S_2$  и  $S_3$ , расположенных соответственно на 0.8, 1.0 и 3.5 эВ ниже уровня Ферми  $E_F$  [5, 6]. Поверхностные состояния  $S_1$  и  $S_3$  приписываются соответственно оборванной связи и валентной связи верхнего атома в димере. Природа состояния  $S_2$  до настоящего времени не выяснена.

Высокая реакционная способность, особенности геометрической и электронной структуры обуславливают особый интерес к исследованиям локальных взаимодействий адатомов металла на поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ . При адсорбции щелочных металлов димерная структура поверхности, как правило, сохраняется, и адатомы могут занимать различные позиции на поверхности, так называемые адсорбционные места. Несмотря на большое разнообразие экспериментальных работ, многие вопросы, касающиеся количества адсорбционных мест, типа проводимости формирующегося интерфейса, величины насыщающего покрытия и характера адсорбционной связи при адсорбции щелочных металлов на поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ , остаются дискуссионными. Работы по исследованию электронной структуры ультратонких интерфейсов  $\text{Ba}/\text{Si}(100)2 \times 1$  в настоящее время отсутствуют. В работе [7] проведены исследования адсорбции  $\text{Ba}$  на поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$  методами спектроскопии потерь электронов, термодесорбции, а также измерена работа выхода.

Нами впервые проведены исследования электронной структуры интерфейса  $\text{Ba}/\text{Si}(100)2 \times 1$  в актуальной энергетической области вблизи вершины объемной валентной зоны и уровня Ферми совместно с определением ионизационной энергии при субмонослойных покрытиях 0.2–1.5 монослоя. Использован метод пороговой фотоэмиссионной спектроскопии. Полученные результаты адекватно описываются в рамках модели двойного слоя, предложенной для адсорбции щелочных металлов на поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ . Проведено сравнение адсорбции  $\text{Ba}$  и  $\text{Cs}$  на поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ , и показано, что при формировании данных границ раздела определяющая роль принадлежит подложке.

## 2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследовался образец ( $p$ -тип, 7.5 Ом·см) монокристалла Si(100), легированный бором КДБ-7 и предварительно подвергнутый травлению на воздухе по стандартной методике [8]. Чистая поверхность Si(100)  $2 \times 1$  была получена после удаления тонкого оксидного слоя путем отжига до 1230 К в высоком вакууме и далее с использованием хорошо известного режима ступенчатого охлаждения. Атомарно чистый барий наносился на поверхность образца из стандартного источника (испаритель BaNi [9]). Интенсивность Ва-источника поддерживалась постоянной во всех экспериментах. Все измерения были выполнены *in situ* в условиях сверхвысокого вакуума  $P \leq 1 \cdot 10^{-10}$  Торр, что позволяет исключить влияние воздействия остаточного кислорода, если время эксперимента не превышает 1800 с. При данных вакуумных условиях исследования проводились с использованием метода пороговой фотоэмиссионной спектроскопии, основанного на селективном  $s$ - и  $p$ -поляризованном возбуждении объемной фотоэмиссии и фотоэмиссии с поверхностных состояний, а также на эффекте порогового усиления фотоэмиссии из поверхностной зоны при квазирезонансном возбуждении. Детальное описание метода изложено в работах [1, 10, 11]. Метод обладает высоким оптическим разрешением ( $\Delta E \sim 0.01$  эВ) и по чувствительности существенно превосходит другие фотоэмиссионные методы. К достоинствам метода следует отнести его принципиально неразрушающий характер. Пороговая фотоэмиссионная спектроскопия позволяет получать детальную информацию о структуре поверхностных зон вблизи уровня Ферми и вершины объемной валентной зоны (valence band maximum) из спектров поверхностной фотоэмиссии  $I_p(h\nu)/I_s(h\nu)$ . Одновременно проводится определение ионизационной энергии  $\phi$ , которая представляет собой порог фотоэмиссии для  $s$ -поляризованного возбуждения ( $h\nu_s = \phi$ ). В случае  $p$ -поляризованного возбуждения порог фотоэмиссии  $h\nu_p$  соответствует либо положению длинноволнового края поверхностной зоны, если он расположен между вершиной валентной зоны и  $E_F$ , либо положению  $E_F$ , если зона имеет металлический характер и пересекает уровень Ферми.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Адсорбция Ва на поверхности Si(100)  $2 \times 1$  приводит к резкому понижению порогов фотоэмиссии. На рис. 1а представлены кривые изменения порога  $h\nu_s$  объемной фотоэмиссии, т.е. ионизационной энергии ( $h\nu_s = \phi$ ), и порога  $h\nu_p$  поверхностной фотоэмиссии при увеличении времени напыления бария. Обнаружено, что во всем исследованном диапазоне Ва-покрытий фотоэмиссионные пороги различны,  $h\nu_s > h\nu_p$ , что доказывает существование поверхностных состояний в запрещенной зоне. С ростом степени покрытия наблюдается существенное увеличение разницы в порогах от  $\sim 0.02$  до  $\sim 0.1$  эВ. Видно, что после участка резкого уменьшения ионизационной энергии, который наблюдается при временах напыления  $t < 200$  с, начинается участок медленного изменения  $\phi$  со слабо выраженным минимумом  $\phi_{min} = 2.15 \pm 0.01$  эВ. Для точного определения времени напыления Ва, соответствующего  $\phi_{min}$ , регистрировались зависимости фотоэмиссионного тока  $I_s$  при  $s$ -поляризованном возбуждении кадмиевым лазером ( $h\nu = 2.81$  эВ) от времени напыления Ва. Принималось во внимание, что максимум зависимости  $I_s(t)$  соответствует  $\phi_{min}$  [11]. Рисунок 1б показывает, что максимум  $I_s$  достигается при времени  $t = 800$  с напыления Ва. Покрытие Ва, полу-

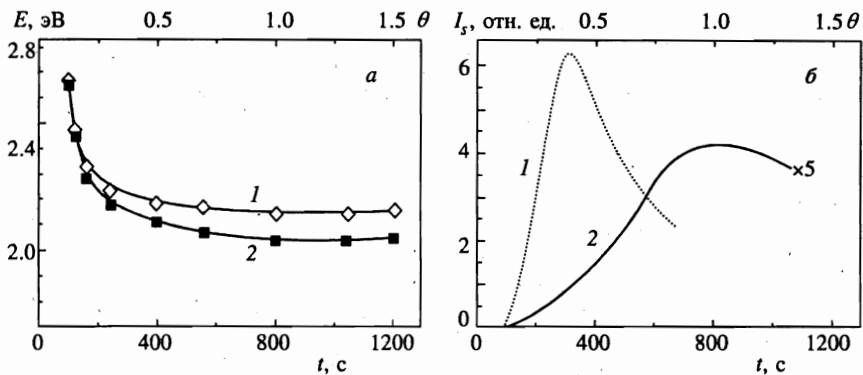


Рис. 1. Изменения в зависимости от времени напыления Ва: а) фотоэмиссионных порогов  $h\nu_s = \phi$  (кривая 1) и  $h\nu_p$  (кривая 2) при возбуждении образца Ва/Si(100)2  $\times$  1 s- и p-поляризованным светом; б) интегрального фотоэмиссионного тока  $I_s$  для систем Ва/W(110) (кривая 1) и Ва/Si(100)2  $\times$  1 (кривая 2) при различных степенях  $\theta$  (верхняя шкала) покрытия Ва (в монослоях)

ченное при данном времени напыления, соответствует так называемому насыщающему покрытию  $\theta_{sat}$ , поскольку, по определению,  $\theta_{sat}$  является покрытием, необходимым для достижения минимума работы выхода и ионизационной энергии системы.

Для определения поверхностной концентрации Ва при насыщающем покрытии  $\theta_{sat}$  была использована методика, предложенная в работе [11]. Расчет проводился исходя из экспериментально полученного соотношения (см. рис. 1б) времен напыления Ва при достижении максимумов фототока для исследуемой системы Ва/Si(100)2  $\times$  1 ( $t = 800$  с) и для эталонной системы Ва/W(110) ( $t = 300$  с). Для системы Ва/W(110) поверхностная концентрация адатомов, соответствующая максимуму фототока, хорошо известна и составляет  $2.5 \cdot 10^{14}$  атом/см $^{-2}$  [9]. Следует указать также, что в пределах одного монослоя коэффициент прилипания Ва равен единице для обеих поверхностей. Следовательно, экспериментально полученная нами величина поверхностной концентрации адатомов Ва на подложке Si(100)2  $\times$  1 при насыщении составляет  $\theta_{sat} = (6.8 \pm 0.1) \cdot 10^{14}$  атом/см $^2$ . Данная концентрация соответствует одному монослою. Отметим, что покрытие, равное одному монослою, одинаково для любой реконструкции поверхности Si(100) и определяется как плотность атомов кремния на поверхности Si(100)1  $\times$  1, что составляет  $6.78 \cdot 10^{14}$  атом/см $^2$  [4]. Таким образом, исходя из изложенных экспериментальных данных можно оценить насыщающее покрытие Ва на поверхности Si(100)2  $\times$  1 как монослойное.

Разность между порогами при достижении монослойного покрытия составляет 0.11 эВ и далее не меняется, что свидетельствует о неизменном положении края поверхностной зоны по отношению к вершине объемной валентной зоны. Анализ поверхностной фотоэмиссии  $h\nu_p$  вблизи порога показывает, что плотность поверхностных состояний на уровне Ферми  $E_F$  равна нулю во всем исследуемом диапазоне покрытий, т. е. край поверхностной зоны лежит между вершиной объемной валентной зоны и  $E_F$ . Таким образом, установлено наличие энергетической щели в спектре поверхностных состояний системы Ва/Si(100)2  $\times$  1 и отсутствие металлизации интерфейса вплоть до Ва-покрытий  $\theta \approx 1.5$  монослоя.

На рис. 2 представлены спектры поверхностной фотоэмиссии  $I_p(h\nu)/I_s(h\nu)$  систе-

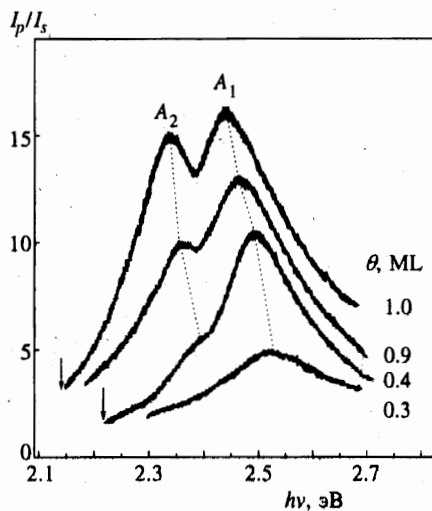


Рис. 2. Спектры поверхностной фотоэмиссии  $I_p/I_s$  для системы Ba/Si(100) $2 \times 1$  при различных субмонослойных покрытиях Ba (степень покрытия  $\theta$  в монослоях приведена у кривых).  $A_1$  и  $A_2$  — поверхностные зоны, индуцированные адсорбцией Ba; стрелками показано положение вершины валентной зоны

мы Ba/Si(100) $2 \times 1$  для различных Ba покрытий. Спектры отражают плотность поверхностных состояний, расположенных ниже вершины валентной зоны. С увеличением степени Ba-покрытия наблюдается формирование двух поверхностных зон,  $A_1$  и  $A_2$ . Зона  $A_1$  появляется при малых покрытиях  $\theta \approx 0.2$  монослоя. На рис. 2 для  $\theta = 0.3$  монослоя четко виден максимум при  $h\nu = 2.53$  эВ. С ростом степени Ba-покрытия плотность состояний в зоне  $A_1$  увеличивается, причем резкое возрастание наблюдается в диапазоне степеней покрытия от 0.3 до 0.5 монослоя. Зона  $A_2$  с максимумом при  $h\nu = 2.38$  эВ, обладающая меньшей, чем  $A_1$  энергией связи, обнаруживается в спектре при покрытиях близких к 0.4 монослоя. Наблюдается аналогичный процесс увеличения плотности состояний в зоне с ростом степени Ba-покрытия, и при достижении одного монослоя зона  $A_2$  завершает свое формирование. Разница в энергиях связи для двух зон составляет 0.1 эВ. Таким образом, адсорбция Ba на поверхности Si(100) $2 \times 1$  приводит к возникновению двух индуцированных зон, максимумы которых расположены ниже вершины объемной валентной зоны.

При адсорбции адатомы могут занимать различные позиции на поверхности — адсорбционные места (рис. 3). Расчеты показали существование четырех возможных адсорбционных мест на поверхности Si(100) $2 \times 1$  [12, 13]. Два из них расположены между рядами димеров и два над рядами димеров. Адсорбционное место 1 — впадина (cave) — находится между рядами димеров над атомом кремния третьего слоя, место 2 — долина (valley) — помещается между рядами димеров над атомом кремния второго слоя, место 3 — пьедестал (pedestal) — находится между атомами димеров, место 4 — мост (bridge) — расположено над атомами димеров. В настоящее время экспериментальные и теоретические результаты по адсорбции щелочных металлов трактуются с точки зрения двух альтернативных моделей. Модель одномерных металлических цепочек была предложена в [14] для случая адсорбции Cs на Si(100) $2 \times 1$ . Согласно этой модели, атомы Cs занимают одно адсорбционное место 3 — пьедестал. Интерфейс имеет металлический характер; а насыщающее покрытие составляет 0.5 монослоя, т. е. достигается при взаимодействии адатомов только с половиной активных оборванных связей подложки. В дальнейшем эта модель была распространена на адсорбцию K и Na на поверхности

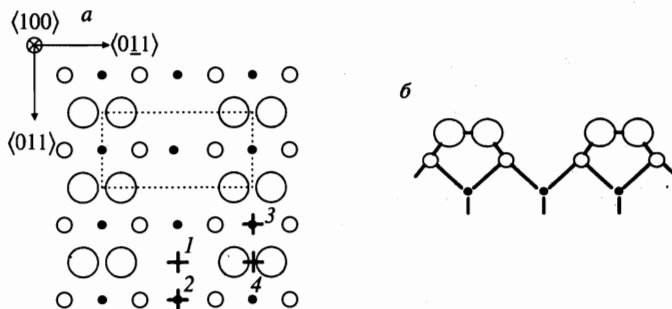
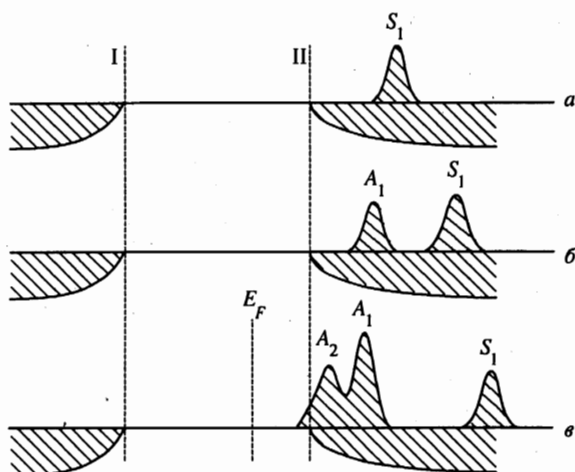


Рис. 3. Схематическое изображение димерно-реконструированной поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$  (большие кружки — верхний слой (атомы димеров), маленькие кружки — второй слой, черные кружки — третий слой) и возможных адсорбционных мест (кресты): *a* — вид сверху, *б* — вид сбоку

$\text{Si}(100)2 \times 1$ , однако предполагалось, что наиболее вероятным адсорбционным местом для адатомов является место 1 — впадина [15, 16].

С другой стороны, для адсорбции Cs и K на  $\text{Si}(100)2 \times 1$  на основании различных экспериментальных данных была предложена модель двойного слоя [17]. В этой модели адсорбция осуществляется на два неэквивалентных адсорбционных места: пьедестал (3) и долину (2), см. рис. 3. В этом случае насыщающее покрытие составляет 1 монослой и соответствует заполнению всех активных оборванных связей подложки. Эта модель в дальнейшем была распространена на адсорбцию других щелочных металлов и поддержана большим количеством экспериментальных [18–20], а также теоретических работ [21, 22]. В этих работах показано также, что интерфейс щелочной металл/ $\text{Si}(100)2 \times 1$  имеет полупроводниковый характер при насыщающем покрытии. Различия в адсорбционных процессах и особенности локальных взаимодействий, заложенные в моделях, оказываются принципиальными для формирования металлического или полупроводникового типа электронной структуры интерфейса.

Полученные нами экспериментальные данные для интерфейса Ba/ $\text{Si}(100)2 \times 1$  адекватно описываются в рамках модели двойного слоя. Существование двух индуцированных зон указывает на то, что адсорбция Ba осуществляется на два неэквивалентных адсорбционных места. На начальном этапе формирования интерфейса локальное взаимодействие адатомов Ba с активными оборванными связями поверхности происходит преимущественно на одном адсорбционном месте и обладает большей энергией связи. При достижении степени покрытия  $\simeq 0.4$  монослоя адатомы Ba начинают занимать другое адсорбционное место с меньшей энергией связи. Как показывают теоретические исследования [13, 21], одно адсорбционное место должно быть в одном ряду с димерами (место 3 или 4, рис. 3), а другое — между рядами димеров (место 1 или 2, рис. 3). В модели асимметричных димеров наиболее вероятна адсорбция на место 3 (пьедестал), наименее вероятна — на место 4 (мост), тогда как адсорбционные места 1 и 2 равновероятны. Поэтому в системе Ba/ $\text{Si}(100)2 \times 1$  адсорбция может осуществляться либо на места 1 и 3, либо на места 2 и 3. При насыщающем покрытии, которое определено как монослойное, оба адсорбционных места заняты, что подтверждается завершением развития спектра поверхностных индуцированных зон. Адсорбция Ba приводит к незначительному увеличению плотности поверхностных состояний в запрещенной зоне,



**Рис. 4.** Схематическая диаграмма электронной структуры поверхностных зон для чистой поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$  (а) и для системы  $\text{Ba}/\text{Si}(100)2 \times 1$  при различных субмонослойных покрытиях Ва: 0.3 монослоя (б) и 1 монослой (в).  $S_1$  — собственное поверхностное состояние поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ ; I — вершина зоны проводимости; II — вершина валентной зоны

интерфейс имеет полупроводниковый характер вплоть до 1.5 монослоев. Адсорбционная связь носит преимущественно ковалентный характер с частичным переносом заряда к оборванным связям подложки.

На рис. 4 схематически представлено положение поверхностных электронных зон относительно вершины валентной зоны (II) для ультратонких интерфейсов  $\text{Ba}/\text{Si}(100)2 \times 1$ . На верхнем рисунке изображена чистая поверхность  $\text{Si}(100)2 \times 1$ , где представлено только одно поверхностное состояние  $S_1$  с наименьшей энергией связи. При адсорбции щелочных металлов данное собственное поверхностное состояние сдвигается в сторону больших энергий связи [18]. Мы предполагаем наличие аналогичного сдвига при адсорбции Ва, что освобождает энергетическую область  $\sim 1$  эВ ниже  $E_F$  для формирования индуцированных барьером зон  $A_1$  и  $A_2$ . При монослойном покрытии низкоэнергетический край зоны  $A_2$  находится между  $E_F$  и вершиной валентной зоны, что соответствует различным фотоэмиссионным порогам для объемной и поверхностной фотоэмиссии (см. рис. 1а).

Сопоставление результатов исследований адсорбции Ва и Cs показывает, что в обоих случаях интерфейс имеет полупроводниковый характер вплоть до 1.5 монослоев, насыщающее покрытие составляет 1 монослой, и электронная структура имеет две индуцированные зоны, соответствующие двум неэквивалентным адсорбционным местам для поверхности  $\text{Si}(100)2 \times 1$ . Все полученные результаты хорошо согласуются с моделью двойного слоя, что ранее было показано нами для системы  $\text{Cs}/\text{Si}(100)2 \times 1$  [23]. Обнаруженные эффекты свидетельствуют о доминирующем влиянии свойств подложки  $\text{Si}(100)2 \times 1$  на процесс формирования интерфейсов. Таким образом, можно утверждать, что характер локальных взаимодействий для таких двух различных адсорбатов как Cs и Ва диктуется поверхностью  $\text{Si}(100)2 \times 1$ , в отличие от поверхности  $\text{Si}(111)7 \times 7$ , где превалирует влияние адсорбатов.

Работа выполнена при поддержке гранта №96-2-28 программы «Поверхностные атомные структуры» Министерства науки Российской Федерации и гранта №98-02-18265 Российского фонда фундаментальных исследований.

## Литература

1. G. V. Benemanskaya, D. V. Daineka, and G. E. Frank-Kamenetskaya, *Phys. Low-Dim. Struct.* **10/11**, 233 (1995).
2. K. O. Magnusson, S. Wiklund, R. Dudde et al., *Phys. Rev. B* **44**, 5657 (1991).
3. G. V. Benemanskaya, G. E. Frank-Kamenetskaya, and M. N. Lapushkin, *Surf. Sci.* **331-333**, 552 (1995).
4. W. Monch, *Semiconductor Surfaces and Interfaces*, Springer-Verlag, Berlin (1993).
5. J. Pollmann, P. Kruger, and A. Mazur, *J. Vac. Sci. Technol. B* **5**, 945 (1987).
6. L. S. O. Johansson, R. I. G. Uhrberg, P. Vartensson et al., *Phys. Rev. B* **42**, 1305 (1990).
7. D. Vlachos, M. Kamaratos, and C. Papageorgopoulos, *Sol. St. Comm.* **90**, 175 (1994).
8. F. Ishizaka and Y. Shiraki, *J. Electrochem. Soc.* **133**, 666 (1986).
9. A. G. Fedorus, A. G. Naumovets, and Yu. S. Vedula, *Phys. Stat. Sol. (a)* **13**, 445 (1972).
10. Г. В. Бенеманская, М. Н. Лапушкин, М. И. Урбах, *ЖЭТФ* **102**, 1664 (1992).
11. Г. В. Бенеманская, Д. В. Дайнека, Г. Э. Франк-Каменецкая, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 699 (1997).
12. Ye Ling, A. J. Freeman, and B. Delley, *Phys. Rev. B* **39**, 10144 (1989).
13. R. Ramirez, *Phys. Rev. B* **40**, 3962 (1989).
14. J. D. Levine, *Surf. Sci.* **34**, 90 (1973).
15. C. M. Wei, H. Huang, S. Y. Tong et al., *Phys. Rev. B* **42**, 11284 (1990).
16. P. Soukiassian, L. Spiess, P. S. Mangat et al., *J. Vac. Sci. Technol. B* **11**, 1431 (1993).
17. T. Abukawa and S. Kono, *Phys. Rev. B* **37**, 9097 (1988); *Surf. Sci.* **214**, 141 (1989).
18. A. J. Smith, W. R. Graham, and E. W. Plummer, *Surf. Sci.* **243**, L37 (1991).
19. T. Abukawa, T. Kashiwakura, T. Okane et al., *Surf. Sci.* **303**, 146 (1994).
20. Y.-C. Chao, L. S. O. Johansson, C. J. Karlsson et al., *Phys. Rev. B* **52**, 2579 (1995).
21. I. P. Batra, *Phys. Rev. B* **39**, 3919 (1989); **43**, 12322 (1991).
22. H. Ishida and K. Terakura, *Phys. Rev. B* **40**, 11519 (1989).
23. G. V. Benemanskaya, D. V. Daineka, and G. E. Frank-Kamenetskaya, *Surf. Rev. Lett.* **5**, № 1-2 (1998).