

УДК 538.91, 538.915

А.А. АЛЕКСЕЕВ*, В.Г. КОТЛЯР*, О.А. УТАС*, Д.В. ГРУЗНЕВ*,
А.В. МАТЕЦКИЙ*, А.В. ЗОТОВ*, А.А. САРАНИН***АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА
ПОВЕРХНОСТИ Si(100)-c(6×2)-Ag****Ключевые слова:** взаимодействие атом–подложка, кремний, серебро, поверхностные структуры, морфология, шероховатость, топография, теория функционала плотности, сканирующая туннельная микроскопия**Keywords:** atom–solid interactions; silicon; silver; surface structure, morphology, roughness, and topography; density functional theory calculations; scanning tunneling microscopy**1. Введение**

Металлические проволоки атомного масштаба, формируемые на поверхности полупроводников, представляют интерес по двум причинам. Во-первых, они интересны благодаря своему потенциальному применению в технологии производства наноразмерных устройств и, во-вторых, — из-за экзотичности явлений, возникающих в указанных квазиодномерных системах. Среди прочих, квантовые проволоки из серебра на поверхности кремния являются одной из наиболее многообещающих систем, поскольку Ag — это металл с высокой величиной проводимости, а Si — основной материал полупроводниковой промышленности. Последние исследования в данной области касались формирования серебряных проволок атомного размера на высокоиндексной поверхности Si(557) [1, 2], на атомной реконструкции Si(111)-6×1-Ag [3, 4] и на структуре c(12×2), в которую реконструкция 6×1 переходит при низких температурах [5–7]. Известные квазиодномерные системы Ag/Si выглядят как ряды атомов Ag, разделенные плоскими лентами Si (как на Si(557)) или дорожками Si (как на Si(111)). Возможный кандидат, имеющий схожее расположение атомов, — это реконструкция Si(100)-c(6×2)-Ag. Впервые существование данной поверхностной реконструкции было отмечено в СТМ-исследованиях в работе [8], позднее подтверждено в дифракции медленных электронов (ДМЭ) [9]. В дальнейшем изучение структуры c(6×2) проводились

* Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, г. Владивосток.

© Коллектив авторов, 2010.

методами фотоэлектронной спектроскопии [10] и СТМ [11]. Несмотря на проведенные исследования, структурная модель Si(100)-c(6×2)-Ag до сих пор остается неизвестной.

В настоящей работе представлен анализ известных данных по стехиометрическому составу, структуре и СТМ-изображениям поверхности Ag/Si(100)-c(6×2) и предложен ряд структурных моделей. Для выбора наиболее энергетически выгодной из них и проверки стабильности каждой из моделей рассчитывалась полная энергия системы. Помимо этого, было проведено сравнение экспериментальных и расчетных СТМ-изображений.

2. Детали экспериментов и расчетов

Эксперименты проводились на сверхвысоковакуумной установке STM-VT25 производства фирмы «Omicron Nanotechnology» (2.0×10^{-10} Торр), оснащенной сканирующим туннельным микроскопом с переменной температурой образца. Атомарно-чистая поверхность образца была приготовлена в соответствии с процедурой, описанной в работе [12]. Серебро осаждалось с вольфрамовой спирали со скоростью 0.2 МС/мин [1 МС (монослой) имеет плотность $6.8 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$, равную плотности атомов верхнего слоя нереконструированной поверхности Si(100)-1×1]. Вольфрамовые иглы для СТМ-исследований, подготовленные электрохимическим перетравливанием, отжигались *in situ*.

Расчеты полной энергии проводились зонным методом с использованием программы FN96MD [13] с энергией обрезания 40 Ry, реализующей расчет электронной структуры методом Кара–Паринелло [14]. Обменно-корреляционное взаимодействие описывалось приближением локальной плотности Пердю–Зенгера [15, 16]. Псевдопотенциалы строились по схеме Труллера–Мартинса [17] при помощи программного пакета FNIPP [18], при этом для кремния валентными полагались 3s и 3p, для серебра — 4d и 5s электроны. С целью тестирования моделей были рассчитаны постоянные решетки и объемные модули упругости для кристаллических решеток кремния и серебра. Поверхность с ячейкой 6×2 моделировалась периодическим набором пластин, состоящих из пяти слоев Si и атомов Ag и ограниченных с одной стороны адсорбированными атомами водорода. Атомы водорода и атомы кремния нижнего слоя фиксировались, положение остальных атомов могло изменяться в процессе минимизации полной энергии системы. Вакуумный зазор, разделяющий соседние пластины, был взят равным 10 Å. Расчетные СТМ-изображения отражали суммарную плотность электронных состояний по всему энергетическому интервалу [19, 20].

3. Обсуждение и результаты

Рассмотрим, что известно о реконструкции поверхности Si(100)-c(6×2)-Ag. Данная поверхностная реконструкция является метастабильной и формируется после осаждения более 0.5 МС серебра при комнатной температуре и последующего отжига при умеренной температуре от 100 до 200 °С. Ранее сообщалось, что после осаждения, начиная от 0.5 МС Ag, отожженная поверх-

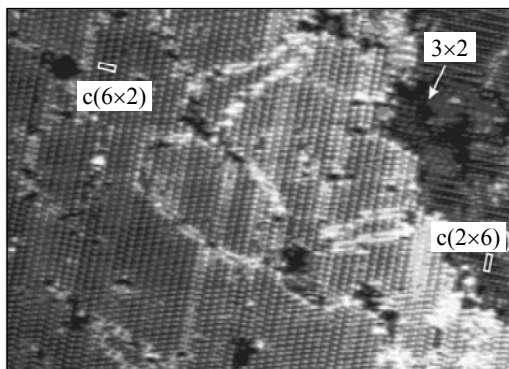


Рис. 1. Панорамное СТМ-изображение ($950 \times 930 \text{ \AA}^2$) поверхности $\text{Si}(100)\text{-c}(6 \times 2)\text{-Ag}$ с редкими включениями реконструкции $\text{Si}(100)\text{-}2 \times 3\text{-Ag}$. Плоскость реконструированной поверхности показывает отсутствие заметного массопереноса Si на большие расстояния, который мог иметь место в процессе ее формирования, что свидетельствует об эквивалентности значений атомной плотности реконструкции и исходной поверхности $\text{Si}(100)\text{-}2 \times 1$ (т.е. 1.0 MC)

ность всегда демонстрирует смесь реконструкций $c(6 \times 2)$ и 2×3 , при этом с ростом покрытия атомов Ag доля площади структуры $c(6 \times 2)$ возрастает и достигает максимального значения ($\sim 70\%$) при 1 MC атомов Ag [11]. Однако мы выяснили, что в эксперименте можно создать поверхность, на которой доля площади со структурой $(6 \times 2)\text{-Ag}$ превышает 90% (рис. 1). Прямое осаждение серебра на поверхность образца, нагретого до температур $100\text{--}250^\circ\text{C}$, приводит к формированию реконструкции 2×3 с редкими включениями небольших доменов $c(6 \times 2)$. При отжиге свыше 250°C структура $c(6 \times 2)$ необратимо переходит в стабильную реконструкцию 2×3 [8–11].

Атомная плотность реконструкции $c(6 \times 2)$ равна плотности атомов оригинальной поверхности $\text{Si}(100)\text{-}2 \times 1$ (т.е. 1.0 MC), поскольку не наблюдается заметного массопереноса атомов кремния на большие расстояния в процессе формирования структуры. Последнее обстоятельство также доказывается плоскостью реконструированной поверхности на крупномасштабном СТМ-кадре на рис. 1. Следует отметить, что данное обстоятельство отличает $c(6 \times 2)$ от реконструкции 2×3 , включающей в себя 0.5 MC Si, которая размещается на двух уровнях (террасах и плоских островках высотой в один атомный слой) [21].

Направление периодичности $\times 6$ реконструкции $c(6 \times 2)$ совпадает с направлением периодичности $\times 2$ исходной реконструкции 2×1 чистой поверхности $\text{Si}(100)$, но ряды $c(6 \times 2)$ направлены перпендикулярно рядам кремниевых димеров. Известные эксперименты не дают достоверной и ясной информации, какое количество атомов серебра включает в себя реконструкция $c(6 \times 2)$. В принципе, степень покрытия серебром может варьироваться от $1/3$ до 1 MC. На СТМ-изображениях реконструкция $c(6 \times 2)$ выглядит как ряды ярких пятен, форма и размер которых зависит от напряжения [11]. (Ниже мы рассмотрим детально этот вопрос в рамках сравнения расчетных и экспериментальных СТМ-изображений).

Помимо упомянутого, при построении модели выдвигалась гипотеза, что периодичность структуры $\text{Si}(100)\text{-c}(6 \times 2)\text{-Ag}$ обусловлена в основном реконструкцией подложки, что является главной особенностью множества структур, сформированных с участием одновалентных атомов на поверхности кремния (например для семейства 3×1 подобных реконструкций на $\text{Si}(111)$ [4, 22–25]). Структура подложки $c(6 \times 2)$ определенно не может сохранить исходную ре-

конструкцию димеров 2×1 . Это означает, что на поверхности кремния должна происходить значительная реорганизация, хотя первоначальная атомная плотность поверхности остается неизменной.

Одна из возможных реконструкций подложки, построенная таким образом, представлена на рис. 2. В этой модели каждый третий ряд поверхностных атомов кремния удален, а высвобожденные атомы размещены над сохранившимися двойными атомными рядами. После димеризации верхних атомов формируется $c(6 \times 2)$

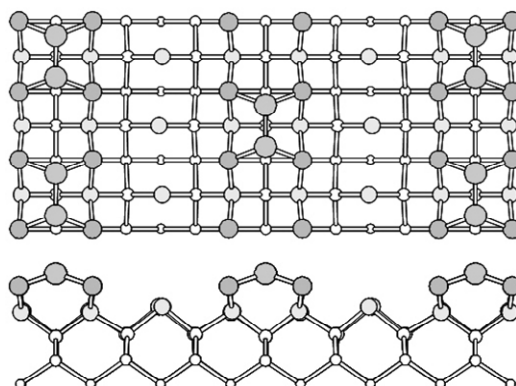


Рис. 2. Структурная модель базовой реконструкции подложки Si(100), использованная для построения моделей поверхности Si(100)- $c(6 \times 2)$ -Ag

Таблица. Модели Si(100)- $c(2 \times 6)$ -Ag с различной степенью покрытия серебром. Относительные энергии формирования структур записаны относительно системы a4, обладающей минимальной энергией

θ_{Ag} , MC	Модели			
	a2, 3.35 эВ	b2, 1.97 эВ	c2, 2.55 эВ	d2, 2.20 эВ
1/6				
	a4, 0	b4, 0.01 эВ	c4, 2.27 эВ	d4, 1.75 эВ
1/3				
	a6, 0.89 эВ	b6, 1.12 эВ	c6, 0.97 эВ	
1/2				
	a8, 0.01 эВ	b8, 0.05 эВ		
2/3				
	a10, 1.56 эВ	b10, 1.75 эВ	c10, 1.49 эВ	d10, 2.69 эВ
5/6				
1	a12, 2.80 эВ			

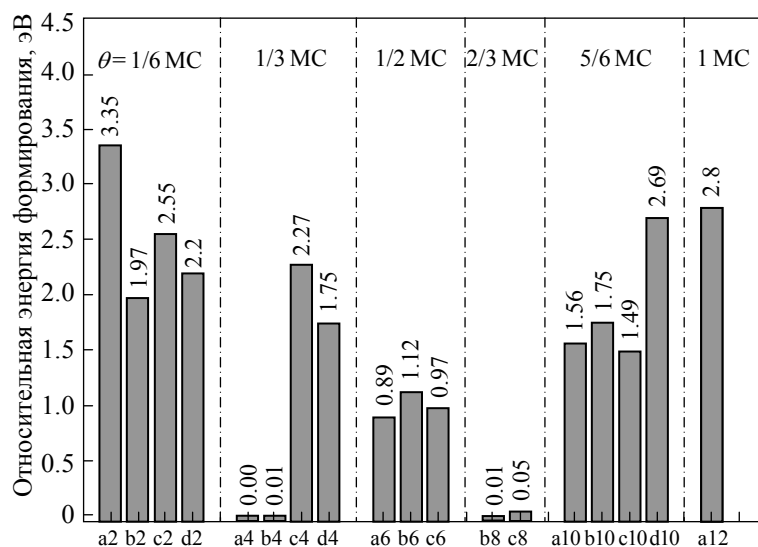


Рис. 3. Схематическая гистограмма, иллюстрирующая расчетные относительные энергии формирования различных моделей (см. таблицу), сгруппированные по степени покрытия Ag

реконструированная поверхность Si(100) с впадинами и гребнями. В дальнейшем эта реконструкция будет рассматриваться как основной элемент структурных моделей, так как она полностью удовлетворяет описанным ранее требованиям.

Поскольку точная «стехиометрическая» степень покрытия серебра в реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag неизвестна, рассматривались модели со всеми возможными значениями: 1/6, 1/3, 1/2, 2/3, 5/6 и 1 MC, что эквивалентно соответственно 2, 4, 6, 8, 10 и 12 атомам Ag на ячейку. Результирующие структурные модели со своими энергиями формирования размещены в таблице. Модели сгруппированы в соответствии с содержанием Ag, а цифра в названии каждой модели определяет количество атомов Ag на ячейку c(6×2), тогда как символы a, b, c, d использованы, чтобы различить модели с одинаковым содержанием атомов серебра.

Для сравнения энергий структур с различным числом атомов Si и Ag в предложенных моделях использовалась энергия формирования поверхности определяемая как [26]

$$\Omega = E(N_{\text{Si}}, N_{\text{Ag}}) - N_{\text{Si}}\mu_{\text{Si}} - N_{\text{Ag}}\mu_{\text{Ag}},$$

где $E(N_{\text{Si}}, N_{\text{Ag}})$ — полная энергия системы, N_{Si} и N_{Ag} — число атомов Si и атомов Ag, а μ_{Si} и μ_{Ag} — энергии на атом в объемных материалах кремния и серебра соответственно.

Как можно видеть, четыре из восемнадцати моделей выделяются из-за наличия низких и очень близких значений энергии. Это модели a4 и b4 с 1/3 MC и модели a8 и b8 с 2/3 MC (рис. 3). Для различных значений степени покрытия серебра разница между a- и b-типом модели заключается в том, что для моде-

лей b-типа кремниевые димеры в соседних гребнях лежат вдоль линии, а для а-типа моделей они сдвинуты вдоль гребня на величину $1a$ относительно друг друга. ($a = 3.84 \text{ \AA}$ — постоянная решетки поверхности $\text{Si}(100)1 \times 1$). Другими словами, модели а-типа имеют периодичность $c(6 \times 2)$, в то время как модели b-типа имеют периодичность 3×2 .

Для выбора оптимальной структуры из упомянутых выше четырех моделей рассматривалось их сходство с СТМ-изображениями высокого разрешения реконструкции $\text{Si}(100)\text{-}c(6 \times 2)\text{-Ag}$. Рисунок 4 включает в себя изображения в обеих полярностях ($\pm 2.0 \text{ В}$) и выглядит схожим с представленными в работе [11], хотя они были записаны при других напряжениях. Это легко увидеть, если сравнить их с СТМ-изображениями (рис. 4а) заполненных состояний (-2.0 В), на которых реконструкция представлена рядами овальных и «бобоподобных» светлых пятен. Основная особенность состоит в том, что овальные яркие пятна наклонены по отношению к ряду в одном из возможных направлений. Эти направления ориентированы приблизительно вдоль

диагоналей прямоугольной ячейки $c(6 \times 2)$. Необходимо отметить, что только ряды овальных светлых пятен, наклоненных в одном направлении, производят массивы с периодичностью $c(6 \times 2)$. Ряды пятен в форме бобов выступают в качестве линейного перехода между доменами овальных пятен с различным направлением наклона. В полярности незаполненных состояний ($+2.0 \text{ В}$) СТМ-изображения реконструкции $c(6 \times 2)$ представлены рядами ярких овальных пятен с блеклыми включениями между ними (рис. 4б). Яркие пятна (продольная ось) ориентированы вдоль прямой линии, параллельной рядам. Анализируя СТМ-изображения обеих полярностей, получаем, что центры светлых пятен, как для незаполненных, так и для заполненных состояний, совпадают.

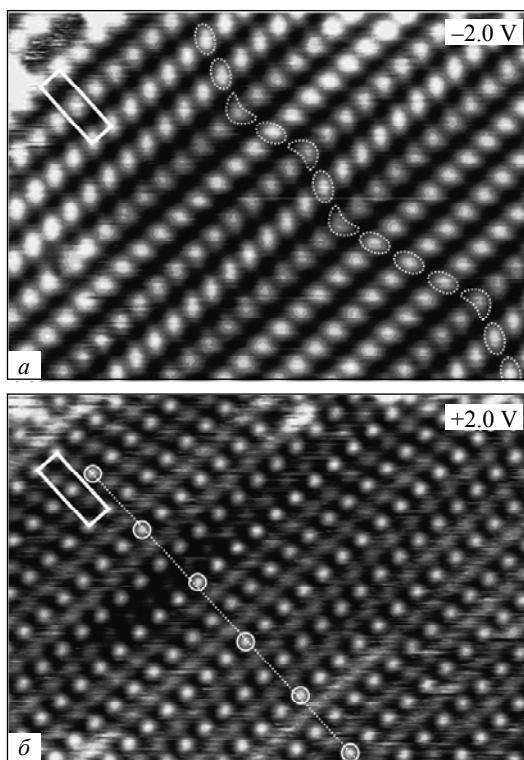


Рис. 4. СТМ-изображения ($160 \times 120 \text{ \AA}^2$) поверхности $\text{Si}(100)\text{-}c(6 \times 2)\text{-Ag}$: (а) заполненные состояния (напряжение на образце $U_s = -2.0 \text{ В}$) и (б) незаполненные состояния ($U_s = +2.0 \text{ В}$). Ячейка $c(6 \times 2)$ выделена сплошной линией. Прерывистой линией на рис. 4а подчеркивается овальная и бобообразная форма светлых пятен. На рис. 4б прерывистая линия — перпендикуляр для рядов, иллюстрирующий, что выделенные светлые пятна не лежат на одной прямой

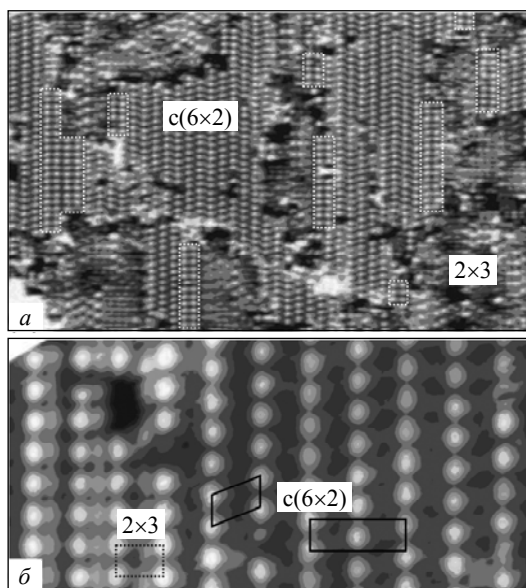


Рис. 5. (а) Панорамное СТМ-изображение ($550 \times 350 \text{ \AA}^2$) незаполненных состояний ($U_s = +1.2 \text{ В}$) поверхности Si(100)-c(6x2)-Ag с включениями реконструкции Si(100)-2x3-Ag. Области, покрытые дефектно модифицированной структурой Ag/Si(100)-c(6x2) с латеральным периодом 3×2 , выделены прерывистыми линиями. (б) Увеличенная область поверхности ($125 \times 60 \text{ \AA}^2$) с «обычной» реконструкцией c(6x2) и ее дефектно формируемой модификацией 3×2 . Ячейки c(6x2) (центрированная прямоугольная и примитивная) выделены сплошной линией, а ячейка 3×2 — прерывистой линией

для моделей а- и б-типа размещение димеров определяет решетки c(6x2) и 3×2 соответственно. Таким образом, в дальнейшем внимание будет концентрироваться на моделях а4 и а8.

Легко видеть, что расчетные СТМ-изображения моделей а4 и а8, представленные на рис. 6, воспроизводят большую часть особенностей экспериментальных СТМ-изображений. Основной особенностью изображений незаполненных состояний являются ряды резких и ярких овальных пятен, ориентированных вдоль этих рядов, тогда как для изображений заполненных состояний особенность заключается в более смазанных пятнах, расположенных на тех же местах, где центры пятен незаполненных состояний (согласно модели, над димерами Si). Однако, в то время как соответствие между экспериментальными и расчетными изображениями незаполненных состояний довольно хорошее, в изображениях заполненных состояний просматриваются

Общая особенность расчетных СТМ-изображений для всех моделей — это соответствие ярких пятен димерам в кадрах для незаполненных состояний. В экспериментальных СТМ-изображениях такие пятна укладываются и определяют порядок совершенной решетки c(6x2) в большей части поверхности, покрытой реконструкцией Si(100)-c(6x2)-Ag, исключая ограниченные области вблизи поверхностных дефектов или доменных границ, где светлые пятна определяют порядок решетки 3×2 . На рис. 5а, эти области выделены прерывистыми линиями. Следует отметить, что структура 3×2 , в сущности, представляет собой дефектную производную реконструкции Si(100)-c(6x2)-Ag и никак не связана со стабильной системой Si(100)-2x3-Ag, которая имеет абсолютно иной вид СТМ-изображений (см. рис. 5а). Возвращаясь к моделям, можно заключить что случаи а4 и а8 можно отнести к структуре Si(100)-c(6x2)-Ag, тогда как модели б4 и б8 имеют дефектную природу, поскольку

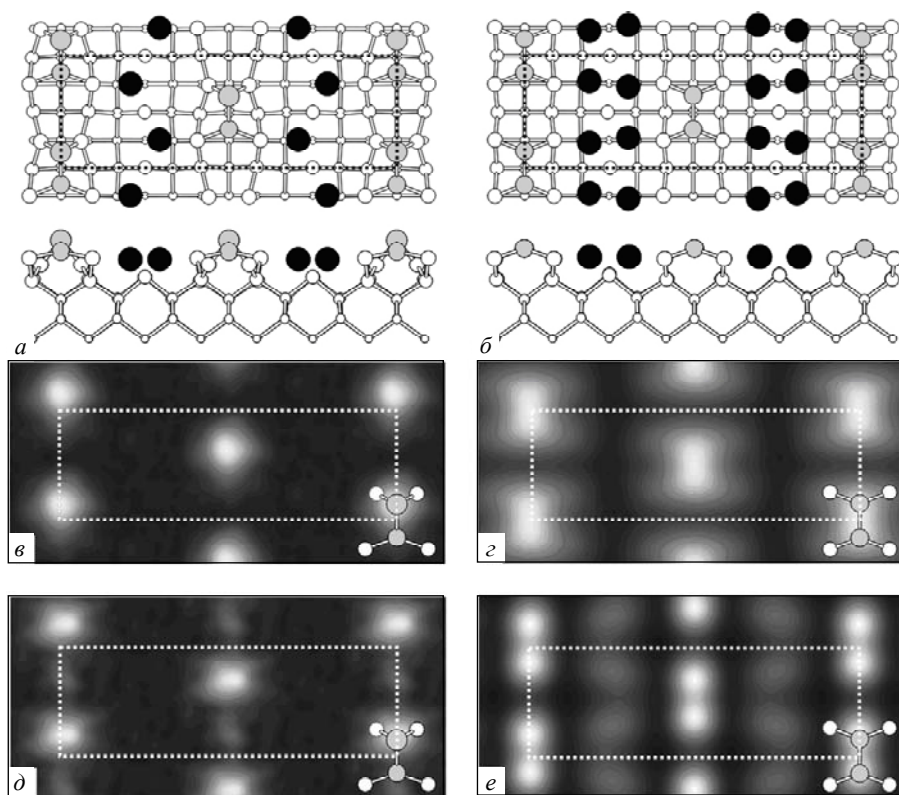


Рис. 6. Модели а4 (а) и а8 (б) с соответствующими расчетными СТМ-изображениями заполненных ($U_s = -2.0$ В) (в) и (г) и незаполненных состояний ($U_s = +2.0$ В) (д) и (е). Ячейки $c(6 \times 2)$ выделены прерывистой линией и на СТМ-изображении указано местоположение Si-димеров в соответствии с их положением в модели

заметные отличия. Модель а8 является зеркально симметричной в отношении обоих основных кристаллографических направлений $[01\bar{1}]$ и $[011]$, модель а4 — зеркально симметрична относительно только одного направления, в то время как экспериментальные СТМ-изображения незаполненных состояний вообще не имеют зеркальной симметрии. Это относится к «истинным» $c(6 \times 2)$ массивам с наклонными пятнами овальной формы, поскольку ячейки, содержащие пятна в форме бобов, могут иметь одну зеркальную плоскость.

Сравнивая две модели, хотелось отметить неочевидную особенность, касающуюся Si димеров. В модели а8 димеры имеют симметричный вид, но они асимметричны в модели а4, в которой атом Si, расположенный рядом с атомами Ag, размещается ниже другого атома, составляющего кремниевый димер. СТМ-изображение незаполненных состояний (см. рис. 4б) лучше описывается моделью с асимметричными димерами из-за того, что светлые пятна скорее круглые, чем продолговатые или овальные. Более того, центры пятен не лежат на одной прямой, перпендикулярной рядам, поскольку димеры, вероятно, обладают асимметрией в двух альтернативных направлениях. Таким образом, эта особенность делает более достоверной модель а4.

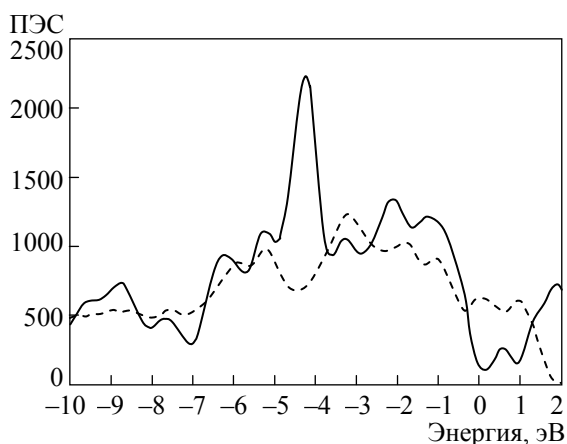


Рис. 7. Графики функций плотности электронных состояний (ПЭС) для моделей a4 (пунктирная линия) и a8 (сплошная линия) реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag

На рис. 7 изображены графики функции плотности электронных состояний (ПЭС) для моделей a4 и a8. Видно сильное отличие, состоящее в том, что если структура a4 демонстрирует высокое значение плотности электронных состояний на уровне Ферми, то для структуры a8 плотность на уровне Ферми низкая. Последнее может показаться довольно курьезным, если брать в расчет то, что модель a8 включает симметричные димеры, известные своим металлическим характером [27]. Должное объяснение этого про-

тиворечия в том, что здесь димер — это лишь элемент более сложной реконструкции, содержащей атомы других химических элементов (т.е. Ag), орбитали которых могут перекрываться с орбиталями кремниевых оборванных связей. Следует отметить, что в процессе исследований фотоэлектронной спектроскопии Матсуда с коллегами [10] выяснил, что поверхность Si(100)-c(6×2)-Ag является полупроводником с запрещенной зоной около 0.7 эВ. С точки зрения электронной структуры, модель a8 имеет большее соответствие реальной системе.

Адекватное сравнение экспериментальных данных с результатами моделирования для реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag является довольно проблематичным, поскольку обычно рассчитываются стабильные структуры в основном состоянии, в то время как реконструкция c(6×2) недостаточно стабильна. Последний тезис хорошо иллюстрируется СТМ-изображением незаполненных состояний системы. Согласно моделям, только реконструкция подложки стабильна, так как яркие овальные пятна (характерные для состояний Si димеров) сплошные, четкие и, несомненно, одинаковой формы. Между тем, особенности, располагающиеся между рядами (которые вероятно соответствуют подсистеме серебра), напротив, различаются от ряда к ряду и часто демонстрируют неопределенность. Эти наблюдения свидетельствуют о различном количестве атомов Ag в желобах между рядами; возможно, они обладают высокой мобильностью в пределах желоба. В попытках стабилизировать атомы поверхности образец охлаждался до температуры 110 K, но эта температура оказалось слишком высокой для того, чтобы заморозить атомы серебра. СТМ-изображения охлажденной поверхности Si(100)-c(6×2)-Ag были идентичными изображениям, полученным при комнатной температуре.

4. Заключение

Используя расчеты в рамках теории функционала плотности, были проведены исследования атомного и электронного строения системы Si(100)-c(6×2)-Ag. Нами рассчитаны энергии ряда структур для двадцати систем, в результате которых число вероятных моделей уменьшилось до двух (a4 (1/3 MC Ag) и a8 (2/3 MC Ag)), каждая из которых только отчасти воспроизводит экспериментально полученные особенности реконструкции, что не позволяет сделать однозначный вывод о структурной модели наблюдаемой реконструкции. Наше обсуждение было направлено на отражение некоторых важных особенностей, подчеркивающих структуру и свойства реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag. Эта структура, вероятно, включает реконструированную поверхность Si(100), сформированную рядами Si-димеров и желобами, разделяющими ряды, в которых размещаются атомы Ag. Атомная структура подложки кремния обладает постоянством и стабильностью. Подсистема Ag, напротив, демонстрирует достаточно большую эластичность из-за присутствия подвижных атомов Ag. Как результат, локальная концентрация (и структура) атомов серебра может варьироваться от времени и места. Это обстоятельство препятствует достоверному сравнению результатов экспериментов и моделирования. Возникновение слабосвязанных атомов Ag, вероятно, является результатом самого процесса формирования реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag. Следует вспомнить, что метастабильная структура формируется при относительно низких температурах и перенасыщении атомами Ag, позволяющих не только вызвать локальную реорганизацию структуры подложки, но и подавить затяжной массоперенос, необходимый для формирования стабильной реконструкции Si(100)-3×2-Ag.

Для более глубокого понимания реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag требуются дополнительные теоретические и экспериментальные исследования. С точки зрения расчетов представляет интерес тестирование альтернативных моделей. Перспективы экспериментальной работы связаны с «замораживанием» движения атомов Ag путем охлаждения поверхности до температуры ниже 100 К.

В качестве заключения необходимо отметить, что реконструкция подложки, использованная в представленном исследовании (см. рис. 2), может рассматриваться как поверхность, построенная из элементов (113) и $(\bar{1}\bar{1}3)$ граней кристалла кремния. Поверхность Si(113) была объектом многочисленных исследований, цель которых заключалась в изучении ее специфической реконструкции 3×2 [29–33]. Некоторые особенности этой структуры видны в реконструкции подложки Si(100), предложенной для системы Si(100)-c(6×2)-Ag. Ранее проводились исследования адсорбции различных металлов (Al [34], Au [35, 36], Cs [37–39], Ga [40, 41], Pb [42], Sb [43–46]) на поверхность Si(113). Однако, насколько нам известно, до настоящего момента данных по исследованию системы Ag/Si(113) в литературе не существует. Возможно, проведение такого рода исследований даст дополнительную информацию для более глубокого понимания свойств реконструкции Si(100)-c(6×2)-Ag, а также для установки связи между этой системой и производными процесса адсорбции металлов на поверхность Si(113).

ABSTRACT

Using the experimental data obtained mainly with the scanning tunneling microscopy observations, density functional theory calculations have been applied to examine an atomic structure of the Si(100)-c(6×2)-Ag reconstruction. A set of structural models have been proposed having a similar Si(100) substrate reconstruction which incorporates rows of top Si-atom dimers and grooves between the rows. Stability of about twenty models with various Ag coverage ranging from 1/6 to 1 ML have been tested, that allows us to reduce the number of plausible models to four. Two of these four models have been attributed to the «regular» intrinsic Si(100)-c(6×2)-Ag reconstruction, while the other two have been attributed to its defect-induced modification. The latter is observed in the local areas near defects and domain boundaries and exhibits 3×2 periodicity. Comparing the results of calculations with the experimental STM images, it has been concluded that the Ag subsystem is flexible due to the presence of the lightly bonded mobile Ag atoms while the Si(100) substrate reconstruction is stable.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Lipton-Duffin J.A., Mark A.G., MacLeod J.M., McLean A.B.* Si(557)-Ag: a metallic quasi-one-dimensional system // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 77, N 12. P. 125419-5.
2. *Morikawa H., Kang P.G., Yeom H.W.* Electronic structure of Ag-induced atomic wires on Si(557) investigated by STS and angle-resolved photoemission // *Surf. Sci.* 2008. Vol. 602, N 24. P. 3745–3749.
3. *Sumitani K., Masuzawa K., Hoshino T., Nakatani S., Takahashi T., Tajiri H., Akimoto K., Sugiyama H., Zhang X.W., Kawata H.* Study of the surface structure of Si(111)-6×1(3×1)-Ag using X-ray crystal truncation rod scattering // *Appl. Surf. Sci.* 2006. Vol. 252, N 15. P. 5288–5291.
4. *Sumitani K., Masuzawa K., Hoshino T., Yoshida R., Nakatani S., Takahashi T., Tajiri H., Akimoto K., Sugiyama H., Zhang X.W., Kawata H.* Structural study of Si(111)-6×1-Ag surface using surface X-ray diffraction // *Surf. Sci.* 2007. Vol. 601, N 22. P. 5195–5199.
5. *Chuang F.C., Hsu C.H., Wang C.Z., Ho K.M.* Atomic and electronic structure of Ag/Si(111)-c(12×2) surface: a first-principles study // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78, N 24. P. 245418–6.
6. *Urbieto A., Schulte K., Grandidier B., Deresmes D., Erwin S.C., Stiévenard D.* (6×2) reconstruction of the Ag/Si(111) surface at 77 K // *Surf. Sci.* 2009. Vol. 603, N 2. P. 311–314.
7. *Urbieto A., Schulte K., Grandidier B., Deresmes D., Erwin S. C., Stievenard D.* Corrigendum to (6×2) reconstruction of Ag/Si(111) surface at 77 K // *Surf. Sci.* 2009. Vol. 603, N 2. P. 311–314; *Surf. Sci.* 2009. Vol. 603, N 7. P. 1079–1079.
8. *Lin X.F., Wan K.J., Nogami J.* Ag on Si(001): Growth behavior of the annealing surface // *Phys. Rev. B.* 1993. Vol. 47, N 16. P. 10947–10950.
9. *Shivaprasad S.M., Abukawa T., Yeom H.W., Nakamura M., Suzuki S., Sato S., Sakamoto K., Sakamoto T., Kono S.* Ag adsorption on a single domain Si(001)2×1 surface studied by electron and photoelectron diffraction // *Surf. Sci.* 1995. Vol. 344. P. L1245–L1251.
10. *Matsuda I., Yeom H.W., Tono K., Ohta T.* Electronic structure of the Si(001)c(6×2)-Ag surface studied by angle-resolved photoelectron spectroscopy using synchrotron radiation // *Phys. Rev. B.* 1999. Vol. 59, N 24. P. 15784–15788.

11. Takeuchi O., Kageshima M., Sakama H., Kawazu A. Scanning tunneling microscopy study on $c(6\times 2)$ structure of Ag/Si(001) // Jpn. J. Appl. Phys. 2001. Vol. 40, N 6B. P. 4414–4418.
12. Hata K., Kimura T., Ozawa S., Shigekawa H. How to fabricate a defect free Si(001) surface // J. Vac. Sci. Technol. A. 2000. Vol. 18, N 4. P. 1933–1936.
13. Beckstedte M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. Density-functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and *ab initio* molecular dynamics // Comp. Phys. Commun. 1997. Vol. 107. P. 187.
14. Car R., Parrinello M. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory // Phys. Rev. Lett. 1985. Vol. 55, N 22. P. 2471–2474.
15. Ceperley D.M., Alder B.J. Ground state of the electron gas by a stochastic method // Phys. Rev. Lett. 1980. Vol. 45. P. 566.
16. Perdew J.P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 23. P. 5048.
17. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 43, N 3. P. 1993–2006.
18. Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio* pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory // Comp. Phys. Commun. 1999. Vol. 119. P. 67.
19. Tersoff J., Hamann D.R. Theory of the scanning tunneling microscope // Phys. Rev. B. 1985. Vol. 31, N 2. P. 805–813.
20. Feenstra R.M. Scanning tunneling spectroscopy // Surf. Sci. 1994. Vol. 299/300, N 1/2. P. 965–979.
21. Tromp R.M., Michely T. Atomic-layer titration of surface reaction // Nature. 1995. Vol. 373. P. 499–501.
22. Saranin A.A., Zotov A.V., Lifshits V.G., Katayama M., Oura K. Family of the metal-induced Si(111) 3×1 reconstructions with a top Si atom density of $4/3$ monolayer // Surf. Sci. 1999. Vol. 426, N 3. P. 298–307.
23. Sakamoto K., Uhrberg R.I.G. Atomic and electronic structures of metal induced Si(111)-(3×1) reconstructed surfaces // e-J. Surf. Sci. Nanotech. 2004. Vol. 2. P. 210–221.
24. Gurnett M., Gustafsson J.B., Holleboom L.J., Magnusson K.O., Widstrand S.M., Johansson L.S.O., Johansson M.K.J., Gray S.M. Core-level spectroscopy study of the Li/Si(111)- 3×1 , Na/Si(111)- 3×1 , and K/Si(111)- 3×1 surfaces // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71, N 19. P. 195408-9.
25. Battaglia C., Aebi P., Erwin S.C. Stability and structure of atomic chains on Si(111) // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78, N 7. P. 075409-5.
26. Takeuchi N. First-principles calculations of the atomic structure of the In-induced Si(001)-(4×3) reconstruction // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63, N 24. P. 245325-7.
27. Dubois M., Perdigão L., Delerue C., Allan G., Grandidier B., Deresmes D., Stiévenard D. Scanning tunneling microscopy and spectroscopy of reconstructed Si(100) surfaces // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71, N 16. P. 165322-10.
28. Yasunaga H., Natori A. Electromigration on semiconductor surface // Surf. Sci. Rep. 1992. Vol. 15. P. 205–280.
29. Stekolnikov A.A., Furthmüller J., Bechstedt F. Adatoms, dimers, and interstitials on group-IV (113) surfaces: First-principles studies of energetical, structural, and electronic properties // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 67, N 19. P. 195332-10.
30. Lee G.D., Yoon E. Structural evolution of the Si(113) surface: *Ab initio* and tight-binding molecular dynamics calculations // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68, N 11. P. 113304-4.
31. Stekolnikov A.A., Furthmüller J., Bechstedt F. Tetramers on diamond, Si, and Ge(113) surfaces: *Ab initio* studies // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68, N 20. P. 205306-5.

32. Mizuno Y., Akimoto K., Aoyama T., Suzuki H., Nakahara H., Ichimiya A., Sumitani K., Takahashi T., Zhang X., Sugiyama H., Kawata H. Structure of the Si(113) surface studied by surface X-ray diffraction // *Appl. Surf. Sci.* 2004. Vol. 237, N 1/4. P. 40–44.
33. Gaál-Nagy K., Onida G. *Ab initio* calculations of the optical properties of the Si(113)3×2 adatom-dimer-interstitial surface // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 75, N 15. P. 155331-9.
34. Ji H., Zhao R.G., Yang W.S. Surface reconstruction and faceting of group III/IV (113) systems-common characteristics of the stable surface structures // *Surf. Sci.* 1997. Vol. 371. P. 349–357.
35. Xing Y.R., Zhang J.P., Huang L.Z.B. A study on the initial stages of Au-(113)Si interface formation // *Sol. State Commun.* 1990. Vol. 74, N 4. P. 319–321.
36. Kurahashi N., Minoda H., Tanishiro Y., Yagi K. In-situ REM study of Au-induced faceting on Si(113) surface // *Surf. Sci.* 1999. Vol. 438, N 1/3. P. 91–96.
37. An K.S., Hwang C.C., Park R.J., Lee J.B., Kim J.S., Park C.Y., Lee S.B., Kimura A., Kakizaki A. Cesium-induced reconstruction on Si(113)3×2 surface studied by low energy electron diffraction and X-ray photoelectron spectroscopy // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1997. Vol. 36, N 5A. P. 2833–2836.
38. An K.S., Hwang C.C., Park C.Y., Kamakura N., Kimura A., Kakizaki A., Suga S. Electronic structure of Si(113)2×2-Cs surface studied by ARUPS // *J. Electr. Spect. Relat. Phenom.* 1998. Vol. 88/91, N 1. P. 701–706.
39. Hwang C.C., An K.S., Kim S.H., Kim Y.K., Park C.Y., Kwon S.N., Song H.S., Jung K.H., Kinoshita T., Kakizaki A., Kang T.H., Kim B. Cesium-induced structural transformation from the Si(113)3×2 to the 3×1 surface // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 2000. Vol. 18, N 4. P. 1473–1477.
40. Suzuki H., Nakahara H., Miyata S., Ichimiya A. Surface morphology of Ga adsorbed Si(113) surface // *Surf. Sci.* 2001. Vol. 493, N 1/3. P. 166–172.
41. Irokawa K., Nagura Y., Kobayashi H., Hara S., Fujishiro H.I., Miki H., Kawazu A., Watanabe K. STM study of Si(113)3×2-Ga surface // *Surf. Sci.* 2009. Vol. 603, N 9. P. 1197–1202.
42. Zhao R.G., Hu C., Yang W.S. Interfacial reaction and surface structures of the Pb/Si(113) system // *Surf. Rev. Lett.* 1995. Vol. 2, N 2. P. 245–254.
43. Wolff G., Müssig H.J., Dabrowski J., Arabczyk W., Hinrich S. Structural models for Sb on Si(113): an experimental and theoretical STM study // *Surf. Sci.* 1996. Vol. 357/358. P. 667–672.
44. An K.S., Hwang C.C., Park C. Y., Kakizaki A. Low-energy electron diffraction and X-ray photoelectron spectroscopy studies of Sb-induced reconstruction on Si(113)3×2 surface // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000. Vol. 39, N 5A. P. 2771–2774.
45. An K.S., Hwang C.C., Kim Y.K., Cho E.S., Park C.Y., Pukird S., Kakizaki A., Okuda T., Kinoshita T. Atomic and electronic structures of Si(113)1×1-Sb surface: core-level shifts and surface states // *Surf. Sci.* 2002. Vol. 513, N 1. P. 49–56.
46. Siebert M., Schmidt Th., Flege J.I., Falta J. Sb-induced reconstructions on Si(113): adatoms as the key elements // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 72, N 4. P. 045323-9.