

## 깨끗한 Si(001) 표면의 buckled dimer 구조 연구 : a(2×1)과 c(4×2)

김성수 · 김용욱\* · 박노길\* · 조원석\* · 김주영\* · 채근화\*  
황정남\* · 김기석\*\* · 최대선\*\*\*

목원대학교 물리학과, \*연세대학교 물리학과 및 초미세 표면과학 연구센터  
\*\*현대전자 메모리연구소, \*\*\*강원대학교 물리학과  
(1997년 8월 11일 접수)

### The buckled structure of clean Si(001) surface : a(2×1) and c(4×2)

S. S. Kim, Y. W. Kim\*, N. G. Park\*, W. S. Cho\*, J. Y. Kim\*, K. H. Chae\*  
C. N. Whang\*, K. S. Kim\*\* and D. S. Choi\*\*\*

Department of Physics, Mokwon University

\*Department of Physics and Atomic-scale Surface Science Research Center, Yonsei University

\*\*Memory R & D Division, Hyundai Electronics Industries Co., Ltd.

\*\*\*Department of Physics, Kangwon National University

(Received August 11, 1997)

**요약** - CAICISS 장치를 이용하여 깨끗한 Si(001) 표면에서 재배열하는 dimer의 원자구조를 분석하였다. Si(001) 표면에서 dimer 원자가 확실히 buckled 되어 있음을 확인하였고, asymmetry( $2 \times 1$ )구조와 c( $4 \times 2$ )구조가 공존하고 있음을 밝혔다. dimer 원자의 결합거리는  $2.3 \pm 0.1 \text{ \AA}$ 이고, buckling 각은  $18 \pm 1^\circ$ 였다.

**Abstracts** - The geometric structure of dimer atoms on clean Si(001) surface was studied using CAICISS. We confirmed that dimer atoms were certainly buckled, and also found that asymmetry ( $2 \times 1$ ) and c( $4 \times 2$ ) were coexisted. The intradimer bond length and the buckling angle of a dimer measured by CAICISS system were  $2.3 \pm 0.1 \text{ \AA}$  and  $18 \pm 1^\circ$ , respectively.

### 1. 서 론

깨끗한 Si(001) 표면의 구조에 관한 연구는 Schlier and Farnsworth 등[1]이 LEED를 사용하여 ( $2 \times 1$ ) 재배열 구조를 확인하면서 시작되었다. 그 후, 30여년이 지난 지금 까지도 깨끗한 Si(001) 표면의 정확한 구조는 아직 밝혀내지 못하고 있다. Si(001) 표면의 구조를 설명하기 위하여 일반적으로 dimer 모형이 받아들여지고 있지만, dimer 원자들이 symmetry인지 asymmetry인지는 아직도 논란이 되고 있다. D.J. Chadi[2]의 연구를 비롯하여 많은 이론적 연구 결과들이 dimer가 buckling을 하고 있다고 주장[3-7]하는 반면, 90년대까지도 symmetric dimer에 대한 연구 결과들[8-11]이 보고되기도 했다. 그러나 최근에는 dimer가 buckling하고 있다는 사실이 일반적으로 받아들

여지고 있고, 나아가서 buckling 구조를 중 asymmetric ( $2 \times 1$ ) 구조보다는 p( $2 \times 2$ )구조나 c( $4 \times 2$ ) 구조가 에너지 관점에서 더 안정하다고 알려져 있다[12-18].

STM을 이용한 실험[19]에서 p( $2 \times 2$ ), c( $4 \times 2$ )구조가 관측되었으며, UHV transmission electron diffraction [20], high resolution core level spectroscopy[21], x-ray standing wave measurements[22], angle-resolved UHV photoelectron spectroscopy[23] 같은 실험결과에서는 asymmetric( $2 \times 1$ ), p( $2 \times 2$ ), c( $4 \times 2$ ) 구조들이 존재한다는 사실이 보고되었다. 이러한 실험 결과들을 요약하면, Si(001) 표면의 주된 구조는 a( $2 \times 1$ ) 구조이고, p( $2 \times 2$ ) 혹은 c( $4 \times 2$ )가 약간 존재하며, 낮은 온도에서는 c( $4 \times 2$ ) 구조가 증가한다는 것이다. 그러나 대부분의 실험결과들은 Si(001) 표면의 전자구조(electronic structure)에 관한 것이

고, bond length, bond direction 등과 같은 dimer 원자의 기하학적 구조에 관한 결과는 거의 없다.

Coaxial impact collision ion scattering spectroscopy (CAICISS) 장치[24,25]는 고체 표면 수 원자 층의 기하학적 구조를 분석하는데 있어서 매우 유용한 장치이다. 입사이온으로 사용하는  $\text{He}^+$  이온은 에너지가 3 keV일 때, 표면의 원자들과 상호작용하는데 걸리는 시간이 약  $10^{-15}$ 초 정도이다. 따라서 CAICISS는 열 등 여러 가지 물리적 요인에 의한 원자들의 진동 등 때문에 생기는 측정상의 오류를 줄일 수 있는 장점이 있다.

본 연구에서는 위와 같은 장점이 있는 CAICISS 장치를 이용하여 Si(001) 표면 dimer들의 buckling 현상 및 기하학적 구조를 연구하고, dimer 원자의 모델을 제시하고자 하며, 이 결과는 타 기구로 연구한 표면 원자층의 기하학적 구조 결과와 좋은 비교가 될 것으로 생각된다.

## 2. 실험 및 분석 원리

실험은 CAICISS 장치가 부착된 UHV chamber에서 진행하였다. chamber의 기본 진공도는  $2 \times 10^{-10}$  torr였고, Si(001) 시료는 상용화된 P-doped Si wafer를 사용하였다. 시료는 1000 K에서 수 시간 동안 열처리한 후, 1300 K까지 발광열처리(flawing)하여 깨끗한 표면을 만들었으며, LEED 실험에서 예상한 2×1 구조가 나타남을 확인하였다.

그림 1은 CAICISS의 분석원리를 간략히 표현한 것으로서, 그림 1-(a)는 시료의 방향을 극각(polar angle,  $\alpha$ )과 방위각(azimuth angle,  $\delta$ )으로 표현한 것이다. 그림 1-(b)의 왼쪽 그림은 고체 표면 원자들을 측면에서 본 것이다. 입사이온빔의 방향을  $\alpha = 0^\circ$ 로부터 점점 증가시키면서  $180^\circ$ 로 후방 산란된 입자를 검출하면, 산란강도가 그림 1-(b)의 오른쪽 그림과 같이 되는데, 이 때 임계각(critical angle)이라 불리는  $\alpha_c$  부근에서 산란강도는 갑자기 증가하게 된다. 이 현상을 focusing 효과라 한다. 이 때  $\alpha_c$ 는 결합거리  $d$ 에 대하여  $d = l / \sin \alpha_c$ 의 관계가 있기 때문에,  $\alpha_c$ 를 결정하면 결합거리  $d$ 를 결정할 수 있다. 그림 1-(c)의 왼쪽 그림은 고체 표면의 평면도(top view)로서 두 개의 원자만 그렸다. 입사 이온의 방향  $\alpha$ 를 고정시켜 두고  $\delta$ 를 A에서 B 방향으로 변화시키면  $180^\circ$ 로 후방 산란된 이온의 강도는 그림 1-(c)의 오른쪽 그림과 같이 나타난다. 이 경우 A와 B에서 두 번의 focusing 효과가 나타나고, 임계각  $\delta_A$ 와  $\delta_B$ 는  $\delta_c = (\delta_A + \delta_B) / 2$ 의 관계가

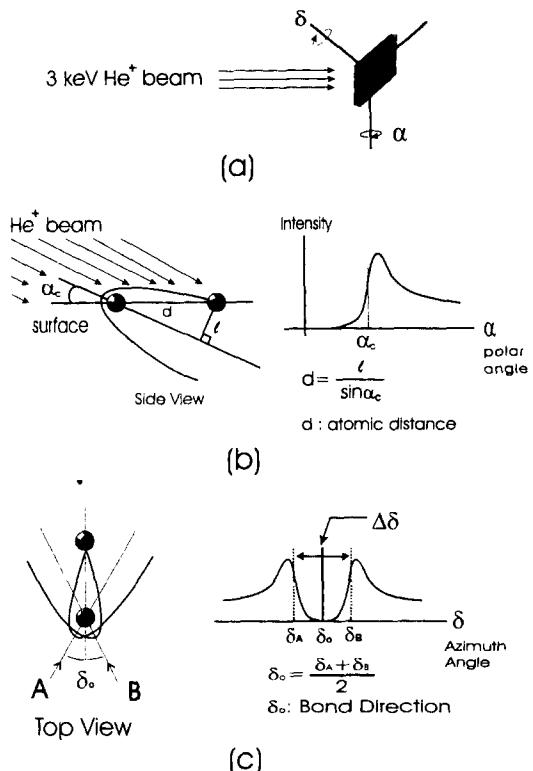


그림 1. CAICISS data의 분석원리. (a) 극각(polar angle,  $\alpha$ )과 방위각(azimuth angle,  $\delta$ )의 정의. (b) 극각을 변화시키면서  $180^\circ$ 로 후방 산란된 이온을 측정했을 때 나타나는 전형적인 산란강도 분포(polar angle scan curve). (c) 방위각을 변화시키면서  $180^\circ$ 로 후방 산란된 이온을 측정했을 때 나타나는 전형적인 산란강도 분포(azimuth angle scan curve).

있다. 여기서 결정된  $\delta_c$ 는 원자의 결합방향이 된다.

## 3. 결과 및 분석

상온에서 dimer 원자가 flip-flop 하는데 걸리는 시간은 약  $10^{-12}$ 초[26] 정도이다. 이 시간은 STM 측정에서 tip의 이동속도( $3 \times 10^3$ 초/원자)보다 매우 빠르므로, STM image 상에서는 bistable state를 갖는 asymmetric dimer들이 symmetric dimer로 관측된다. 그러나 CAICISS 장치에 사용하는 3 keV  $\text{He}^+$  이온이 표면의 dimer 원자들과 상호작용하는데 걸리는 시간은 약  $10^{-15}$ 초 정도이므로  $\text{He}^+$  이온의 관점에서 볼 때 표면의 원자들은 고정되어 있는 것으로 관측된다. Bistable state를 갖는 asymmetric dimer 원자들의 up-flip 상태와 down-flip 상태는 에너지적으로 안정

된 상태이므로 각각의 상태에 머무는 시간이 다른 상태로 이동하는 데 걸리는 시간보다 길게 된다. 따라서  $\text{He}^+$  이온이 up-flip 상태나 down-flip 상태에 머무르고 있는 dimer 원자와 상호작용할 확률이 더 크다고 볼 수 있다. 따라서, CAICISS 스펙트럼에서는 asymmetric dimer들의 기하학적 구조를 규명해 낼 수 있다.

본 연구에서 초점을 둔 dimer 모델들은 4개의 dimer (8개의 표면 Si 원자)들을 기본 단위 구조로 하고 있다. s ( $2 \times 1$ ), a( $2 \times 1$ ), p( $2 \times 2$ ), c( $4 \times 2$ ) 구조를 갖고 있는 원자들의 상대적인 위치는 서로 다르므로, 이러한 차이가 CAICISS 스펙트럼의 극각 scan과 방위각 scan에 나타난다.

그림 2는 각각  $\alpha$ 를 특정한 각도에 고정시켜두고 방위각  $\delta$ 를 변화시키면서 후방산란이온의 강도를 측정한 것이다. 실험 스펙트럼이 [110] 방향과 [100] 방향에 대하여 대칭인데, 이것은 Si(001) 표면의 dimer 열(row)들이 step에 대하여 90°로 회전하여 존재하고 있다는 것을 의미한다. Step에 대하여 dimer 열이 회전하여 존재한다는 것은 STM으로 이미 확인된 바 있다[27].

깨끗한 Si(001) 표면에서는 원자들이 자유에너지 (free energy)를 낮추기 위해서 재배열하는데, 이때 자주 언급되는 재배열 구조 4가지의 평면도를 그림 3에서 보았다. 각 구조에서 원자쌍들을 구분하기 위해 F1~F8, S 1~S5과 같은 표기를 사용하였다. 그리고 s( $2 \times 1$ ), a( $2 \times 1$ ), p( $2 \times 2$ ), c( $4 \times 2$ ) 구조를 구별하기 위하여 SF1, AF1, PF1, CF1로 표기하였다.

그림 4는 이론적 연구에 의하여 제시된 여러 가지 모델에 대하여, 각 원자쌍의 결합방향을  $\alpha$ 대  $\delta$  그래프로 그린 것이다. 예를 들어,  $\alpha=10.5^\circ$ 와  $\delta=30^\circ$  위치에 표시된 빈 원은 Takahashi 모델 중 a( $2 \times 1$ ) 구조에서 F4 원자쌍의 결합방향을 의미한다. 이 그림에서 사각점선 속의 기호들은 다른 부분들과는 달리 기호들이 뒤섞여 있지 않고 뚜렷이 구분되므로, 이것은 Si(001) 표면에 어떤 dimer 구조가 존재하는지를 식별할 수 있는 기준이 될 수 있다. 예를 들어, AF2와 AF4를 나타내는 빈 원은 a ( $2 \times 1$ ) 구조가 존재할 때만 나타나고, PF3를 의미하는 사각형 기호는 p( $2 \times 2$ )나 c( $4 \times 2$ ) 구조가 존재할 때만 나타난다. 그러므로, 우선 Si(001) 표면의 dimer 원자들이 symmetry인지 asymmetry인지를 찾아내기 위하여, 그림 2에서  $\delta=30^\circ$ 와  $\delta=35^\circ$ 의 산란강도변화를 관찰하고자 한다. SF4 와 AF4 원자쌍의 극각은 서로 다르지만 방위각은  $\delta=30^\circ$ 로 서로 비슷하고, SF2와 AF2 원자쌍도 역시 극각은 서로 다르지만 방위각은  $\delta=-55^\circ$ 로서 비슷

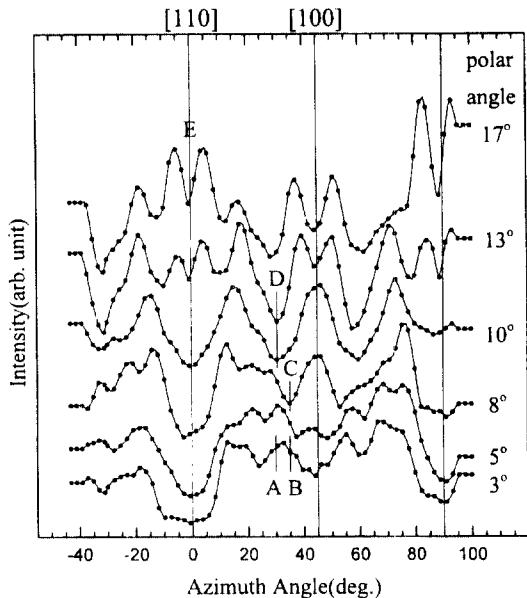


그림 2. 각각을 특정한 각에 두고 측정한 방위각 scan curve.

한 위치에 있기 때문이다. Dimer 구조가 step에 대하여 90°회전해 있을 경우, F2 구조는 실험 스펙트럼 상에서  $\delta=35^\circ$  부근에서 나타난다. 만약 Si(001) 표면에서 symmetry ( $2 \times 1$ ) dimer가 지배적인 구조라면,  $\alpha$ 가  $5^\circ$  이하인 azimuthal scan curve에서는 A( $\delta=30^\circ$ )와 B( $\delta=35^\circ$ ) 위치가 결합방향이므로 각각 강한 골이 나타나야한다. 그러나 그림 2의 실험 스펙트럼에서는 오히려 peak의 형태로 나타나 있음을 볼 수 있으며, C( $\delta=35^\circ$ ,  $\alpha=8\sim10^\circ$ )와 D( $\delta=30^\circ$ ,  $\alpha=10\sim13^\circ$ )에서는 강한 골이 나타나 있다. C 위치에서 나타난 강한 골은 결합방향이  $\delta=35^\circ$ ,  $\alpha=8\sim10^\circ$ 인 원자쌍이 존재한다는 것을 의미하고, D의 경우도 마찬가지이다. C와 D위치에 골이 있다는 것은 표면의 dimer들이 asymmetric 구조를 형성하고 있다는 것을 의미한다. 뿐만 아니라, C와 D는 Takahashi 모델[28]에서 제시된 AF2( $\delta=35.2^\circ$ ,  $\alpha=7^\circ$ )와 AF4( $\delta=30.1^\circ$ ,  $\alpha=10.5^\circ$ ) 원자쌍의 결합방향과 비교적 잘 일치함을 볼 수 있다. 이상의 결과로부터 Si(001) 표면에서 dimer 원자는 s( $2 \times 1$ ) 구조보다는 a( $2 \times 1$ ) 구조가 지배적이라고 볼 수 있다.

그림 2에서 또 하나 주목해야 할 부분은 E( $\alpha=13^\circ$ ,  $\delta=-20^\circ\sim35^\circ$ ) 위치부근에 나타난 4개의 peak들이다. 위치 E에서 peak를 형성할 수 있는 원자쌍은 p( $2 \times 2$ )와 c( $4 \times 2$ ) 구조의 F3 원자쌍 밖에 없다. 그림 3과 그림 4에서 보는 바와 같이, p( $2 \times 2$ )와 c( $4 \times 2$ ) 구조에서의 F3 원자쌍

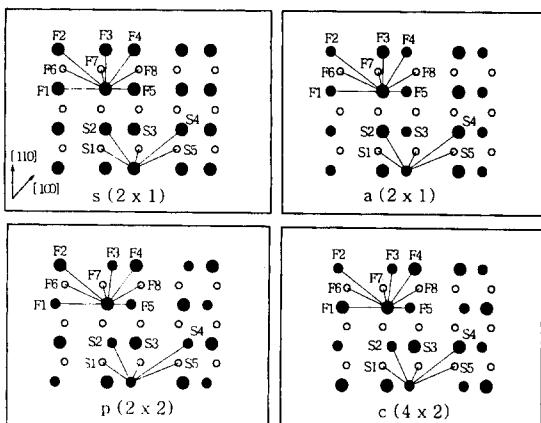


그림 3. 왼쪽 위로부터  $s(2 \times 1)$ ,  $a(2 \times 1)$ ,  $p(2 \times 2)$ ,  $c(4 \times 2)$  구조의 평면도. 각 원자쌍을 구분하기 위하여  $F1 \sim F8$ ,  $S1 \sim S5$ 의 기호를 사용하였다.

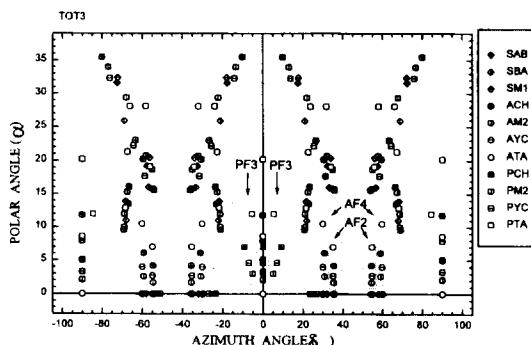


그림 4. 여러 가지 dimer 모델에 대하여, 각 원자쌍의 결합방향( $\alpha$ ,  $\delta$ )을  $\delta : \alpha$ 의 그래프로서 표현한 것(기호의 첫 문자 S, A, P는 각각  $s(2 \times 1)$ ,  $a(2 \times 1)$ ,  $p(2 \times 2)$  구조를 의미하고, 뒤의 두 문자는 dimer 모델을 의미한다. 즉, AB는 AB model[8], BA는 Batra model[9], CH는 Chadi model[2], M2는 M2 model[31], YC는 YC model[3], TA는 Takahashi model[28]을 의미한다.).

은 [110] 방향을 기준으로  $\delta=5^\circ \sim 10^\circ$ 와  $\delta=-5^\circ \sim -10^\circ$ 에 존재하므로, 이에 대해서 이 원자 모델(two atom model)[29]을 이용한 산란이온의 강도를 시뮬레이션한 결과  $\delta=\pm 6^\circ$ 일 때 실험결과와 가장 잘 일치함을 알 수 있고, 이렇게 결정된  $\delta$ 각은 F3 원자쌍의 결합방향이 된다(그림 5). 본 실험의 결과로부터 결정된 F3 원자쌍의 결합방향은  $\delta=6^\circ$ ,  $\alpha=13\sim17^\circ$ 인데, 이 결과도 그림 3에서 보는 바와 같이 Takahashi의 모델( $\delta=5.5^\circ$ ,  $\alpha=12^\circ$ )과 비교적 잘 일치함을 볼 수 있다. PF2와 PF4 원자쌍은 SF2와 SF4 원자쌍과 유사한 구조를 가지고 있고, SF2와 SF4 원자쌍들은 Si(001) 표면에서 주된 구조가 아니라는 것을

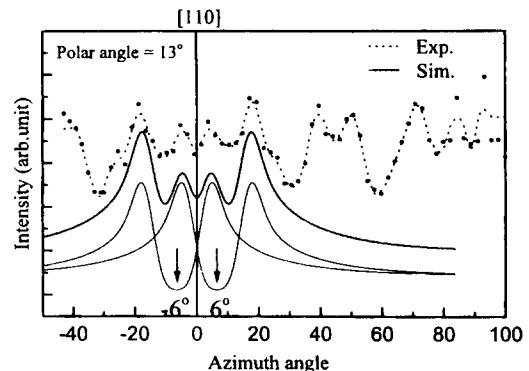


그림 5. 극각이  $13^\circ$ 일 때의 azimuth angle scan curve와 CF3 원자쌍에 의한 산란이온의 강도를 이 원자모델(two atom model)을 이용하여 시뮬레이션한 curve와의 비교.

이미 확인하였다. 그러므로 그림 2의 E에 나타난 4개의 peak는 PF3 원자쌍에 의한 것이 아니라, CF3 원자쌍에 의한 것으로 볼 수 있다. 따라서  $p(2 \times 2)$ 와  $c(4 \times 2)$  구조 중에서는  $c(4 \times 2)$  구조가 더 지배적인 것으로 보인다.

이 결과들을 검증하고 dimer 원자들의 기하학적 구조

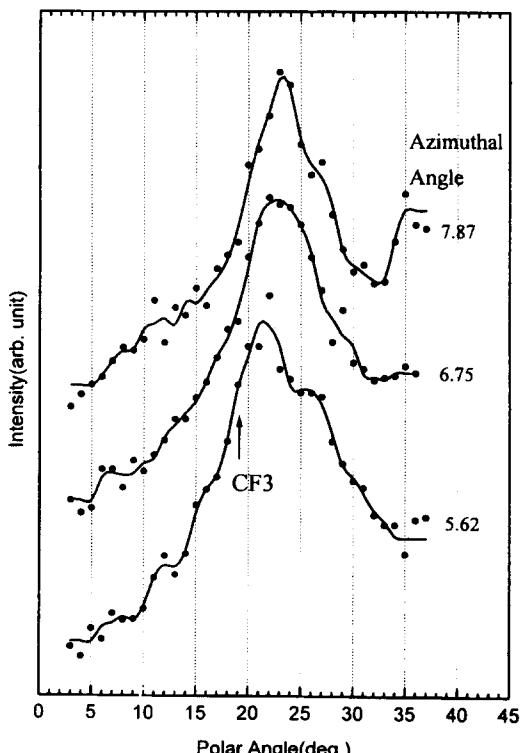


그림 6. 방위각을  $1.25^\circ$  간격을 두고 그린 polar angle scan curve.

를 찾기 위해 그린 것이 그림 6과 그림 7이다. 그림 6과 7은 방위각  $\delta$ 를 고정해두고, 극각  $\alpha$ 를 변화시키면서 산란 이온의 강도를 측정한 polar scan curve이다. 그림 6는 CF3 원자쌍의 존재를 확인하기 위하여  $\delta=6^\circ$  근방에서의 polar scan curve를 그린 것으로,  $\alpha=17\sim21^\circ$  사이에서 CF3 원자쌍에 의한 focusing 효과를 뚜렷이 확인할 수 있다.

그림 7은  $\delta=29.75^\circ$ 에서  $36^\circ$ 까지  $2.25^\circ$ 간격으로 polar scan curve를 그린 것이다. 이 그림에서도  $\delta=30^\circ$ 와  $\delta=35^\circ$  부근에서의 polar scan curve를 주목할 필요가 있다.

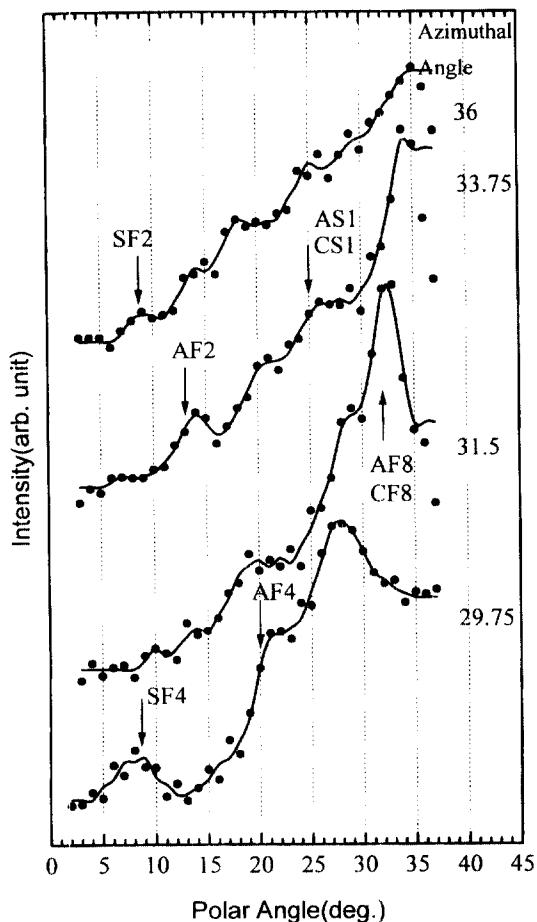


그림 7. 방위각을  $2.5^\circ$  간격을 두고 그린 polar angle scan curve.

만약 symmetry( $2\times 1$ ) dimer 구조가 존재한다면,  $\delta=36^\circ$  와  $\alpha=5\sim10^\circ$  부근(SF2)과  $\delta=29.75^\circ$ ,  $\alpha=5\sim10^\circ$  부근(SF4)에서 SF2와 SF4 원자쌍에 의한 강한 focusing 효과가 있어야 한다. 그러나 SF4 위치에서 약간 나타날 뿐 SF2 위치에서는 peak가 거의 나타나지 않는다. SF4 위치에 약간 나타난 peak의 흔적은 SF4 원자쌍에 의한 것이라기보다는 CF4 원자쌍에 의한 것으로 생각된다. 왜냐하면 SF4 원자쌍에 의한 것이라면 SF2 원자쌍에 의한 peak도 같이 나타나야하는데 SF4 위치에서는 peak의 흔적이 없고, SF4 원자쌍의 결합방향은 CF4의 것과 비슷하기 때문이다. 따라서 symmetry( $2\times 1$ ) 구조는 거의 존재하지 않는다는 것을 확인할 수 있다. 반면, a( $2\times 1$ ) 구조에서 AF2, AF4 원자쌍에 의한 focusing 효과는 그림 7에서 예상되는 위치( $AF2=13\sim15^\circ$ ,  $AF4=19\sim21^\circ$ )에서 뚜렷이 나타나 있음을 볼 수 있다.

이상의 실험 결과를 종합해 보면, Si(001) 표면에는 s ( $2\times 1$ ) 구조는 거의 존재하지 않고, a( $2\times 1$ ) 구조와 c ( $4\times 2$ ) 구조가 공존하고 있음을 확인할 수 있다. 이러한 결과는 최근 STM 결과[30]에서 확인된 바 있다.

표 1은 본 연구의 결과를 이론 결과 및 다른 실험 결과와 비교한 것으로, Takahashi의 data만 실험의 결과이고, 나머지는 모두 이론의 결과이다. 결합거리는 대개  $2.3\sim2.4\text{ \AA}$ 으로 서로 비슷하나, buckling각은 상당히 차이가 있음을 볼 수 있다. 본 실험을 통하여 계산한 buckling각은 이론적 결과( $5\sim12^\circ$ )보다 상당히 크게 측정되었으며, Takahashi의 결과보다는 약간 작게 측정되었다. 그러나 Lee[16] 등의 이론 결과는  $17.1^\circ$ 로서, 우리의 결과와 거의 일치함을 알 수 있다. 그림 2로부터, AF2와 AF4 원자쌍의 결합방향은 각각 C( $\delta=35^\circ$ ,  $\alpha=8\sim10^\circ$ )와 D( $\delta=30^\circ$ ,  $\alpha=10\sim13^\circ$ )이고, 그림 7로부터 AF2와 AF4 원자쌍으로 인한 임계각은 각각  $AF2=13\sim15^\circ$ ,  $AF4=19\sim21^\circ$ 이다. 이 결과로부터 간단한 기하학적 구조를 고려하여 계산한 dimer 원자의 결합거리와 buckling 각은 각각  $2.3\pm0.1\text{ \AA}$ 과  $18\pm1^\circ$ 였다.

본 연구에서 사용한  $\text{He}^+$  이온빔의 반경은  $2\text{ mm}$  이다. 따라서 Si 표면의 넓은 영역에 분포하는 Si dimer들의 주된 구조를 확인할 수 있었다. 그러나 CAICISS 장

표 1. 이론적 계산 및 실험 결과들로부터 얻어진 dimer 원자간 거리와 buckling 각 비교

|                                 | M2[31] | YC[3] | TFD[11] | Chadi[2] | TSSC[32] | Lee[16] | Low[15] | Takahashi[28] | This study  |
|---------------------------------|--------|-------|---------|----------|----------|---------|---------|---------------|-------------|
| D <sub>d</sub> ( $\text{\AA}$ ) | 2.3    | 2.25  | 2.27    | 2.35     | 2.36     | 2.45    | 2.42    | $2.37\pm0.06$ | $2.3\pm0.1$ |
| $\theta(\text{deg.})$           | 5.0    | 7.9   | 9.8     | 11.8     | 13.7     | 17.1    | 9.1     | $20\pm3$      | $18\pm1$    |

치는 두 원자간의 상대적 위치를 측정하는데 민감한 장치이므로, 표면의 dimer row가 zigzag 형태를 갖고 있는지, 특정한 dimer 구조가 얼마나 넓고 일정하게 domain을 형성하는지에 대하여는 규명하기가몹시 어려운 점이 있다. 앞에서도 언급한 바와 같이, CAICISS 장치는 원자들의 상대적인 위치를 전자의 영향없이 직접적으로 규명할 수 있으므로, 이러한 결과를 STM 결과와 비교 분석하면 표면원자의 구조 분석이 보다 용이해질 것으로 보여진다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 CAICISS 장치를 이용하여 깨끗한 Si(001) 표면의 dimer 구조와 원자들의 기하학적 구조를 분석하였다. Si(001) 표면에서 dimer 원자는 확실히 buckled 되어 있음을 확인하였고, asymmetry( $2 \times 1$ )구조와 c( $4 \times 2$ )구조가 공존하고 있음을 알 수 있었다. 그리고, 본 실험의 결과로부터 dimer 원자의 결합거리는  $2.3 \pm 0.1 \text{ \AA}$ 이고, buckling각은  $18 \pm 1^\circ$ 였다.

#### 감사의글

이 연구는 한국과학재단의 핵심전문연구(과제번호 : 961-0210-059-2), 연세대학교 초미세표면과학연구센터를 통한 한국과학재단 우수연구센터, 그리고 교육부 기초과학연구소 학술연구조성비 지원(과제번호 : BSRI-96-2426)에 의해 수행되었습니다.

#### 참고문헌

- R.E. Schlier and H.E. Farnsworth, *J. Chem. Phys.* **30**, 917 (1959).
- D.J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 43 (1979).
- M.T. Yin and M.L. Cohen, *Phys. Rev. B* **24**, 2303 (1981).
- P. Krüger and J. Pollmann, *Phys. Rev. B* **38**, 10578 (1988).
- N. Roberts and R. J. Needs, *Surf. Sci.* **236**, 112 (1990).
- J. Dabrowski and M. Scheffler, *Appl. Surf. Sci.* **56**, 15 (1992).
- P. Krüger and J. Pollmann, *Phys. Rev. B* **47**, 1898 (1993).
- F.F. Abraham and I.P. Batra, *Surf. Sci. Lett.* **163**, L 752 (1985).
- I.P. Batra, *Phys. Rev. B* **41**, 5048 (1990).
- S. Ihara, S.L. Ho, T. Uda and M. Hirao, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1909 (1990).
- S. Tang, A.J. Freeman and B. Delley, *Phys. Rev. B* **45**, 1776 (1992).
- J.P. LaFermina, *Surf. Sci. Rep.* **16**, 133 (1992).
- A.I. Shkrebtii, D.I. Felice, C.M. Bertoni and R.D. Sole, *Phys. Rev. B* **51**(16), 11201 (1995).
- J.E. Northrup, *Phys. Rev. B* **47**, 10032 (1993).
- K.C. Low and C.K. Ong, *Phys. Rev. B* **50**(8), 5352 (1994).
- S.M. Lee and Y.H. Lee, *Surf. Sci.* **347**, 329 (1996).
- J. Dabrowski, E. Pehlke and M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **49**, 4790 (1994).
- A. Garcia and J.E. Northrup, *Phys. Rev. B* **48**, 17350 (1993).
- R.J. Hamers, R.M. Tromp and J.E. Demuth, *Phys. Rev. B* **34**, 5343 (1986).
- G. Jarayam, P. Xu, and L.D. Marks, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3489 (1993).
- E. Landemark, C.J. Karlsson, Y.C. Chao and R.I.G. Uhrberg, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1588 (1992).
- E. Fontes, J.R. Patel and F. Comin, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2790 (1993).
- Y. Enta, S. Suzuki and S. Kono, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2704 (1990).
- M. Aono, K. Katayama, E. Nomura, T. Chasse, D.S. Choi and M. Kato, *Nucl. Instrum. Methods* **B37/38**, 264 (1989).
- K.S. Kim, Y.W. Kim, N.G. Park, K.H. Jeong, S.S. Kim, H.J. Kim, C.N. Whang and D.S. Choi, *J. Kor. Vac. Soc.* **3**(1), 8 (1994).
- K. Cho, J.D. Joannopoulos, *Phys. Rev. Lett.* **71**(9), 1387 (1993).
- H.J.W. Zandvliet, H.B. Elswijk and E.J. van Loenen, *Surf. Sci.* **272**, 264 (1992).
- M. Takahasi, S. Nakatani, Y. Ito, T. Takahashi, X.W. Zhang and M. Ando, *Surf. Sci.* **L338**, 846 (1995).
- R.S. Williams, M. Kato, R.S. Daley and M. Aono, *Surf. Sci.* **225**, 355 (1990).
- A.W. Munz, Ch. Ziegler and W. Gopel, *Phys. Rev. Lett.* **74**(12), 2244 (1995).
- R.G. Zhao, Jinfeng Jia, Yanfang Li, W.S. Yang, Springer series in Surface Science Vol. 24, The structure of surface III, edited by S.Y. Tong, M.A. Van Hove, K. Takayanaki, X.D. Xie (Springer-Verlag, Heidelberg, 1991) pp. 517-521.
- R.M. Tromp, R.G. Smeenk, F.W. Saris and D.J. Chadi, *Surf. Sci.* **133**, 137 (1983).